Thiện căn ở tại lòng ta

Chữ tâm kia mới bằng ba chữ tài

Truyện Kiều của Nguyễn Du

Kính tặng Bộ môn Vật lý Lý thuyết
Đại học Khoa học Tự nhiên
T.P. Hồ Chí Minh

Xuân 2005

Nguyễn Văn Liễn

Nguyễn Văn Liễn
Viện Vật lý,
Trung tâm Khoa học Tự nhiên và
Công nghệ Quốc gia,
10 Đào Tấn, Ba Đình, Hà Nội,
E-mail: nvlien@iop.ncst.ac.vn

TRUNG TÂM KHOA HỌC TỰ NHIÊN VÀ CÔNG NGHỆ QUỐC GIA
VIỆN VẬT LÝ

NGUYỄN VĂN LIÊN

HÀM GREEN
trong vật lý chất rắn
Bài toán một hạt

NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI

Cuốn sách này được hình thành trên cơ sở các bài giảng của tác giả cho sinh viên cao học chuyên ngành vật lý ở Viện Vật lý, thuộc Trung tâm Khoa học Tự nhiên và Công nghệ Quốc gia và ở Khoa Vật lý, thuộc Trường Đại học Sư phạm Hà Nội, trong các năm 1998 - 2003. Mục đích của cuốn sách là cung cấp cho người đọc những khái niệm cơ bản về hàm Green, từ các tính chất toán học đến áp dụng vào các bài toán khác nhau của lý thuyết lượng tử vật rắn, tập trung chủ yếu vào các bài toán một hạt với những mô hình kinh điển. Đó là nội dung chương 2 và các chương 5 - 8. Chương 1, đóng vai trò phần mở đầu, cho tổng quan ngắn gọn các bài toán một hạt trong vật lý chất rắn, sẽ đề cập đến trong các chương sau. Những khái niệm trình bày trong chương 3 và chương 4 là tổng quát cho các hệ có tương tác. Các khái niệm này được sử dụng trong chương 7 và chương 8.

Sau mỗi chương có phần thảo luận bổ sung và bài tập với nội dung trợ giúp, mở rộng hoặc minh họa và vận dụng một cách không phức tạp các kiến thức đã học.

Một lượng rất hạn chế các tài liệu tham khảo được chọn theo nguyên tắc: đó là các bài báo gốc, kinh điển, các bài tổng quan hoặc những cuốn sách được nhiều người sử dụng.

Khi viết cuốn sách này chúng tôi không có ý định dùng một dạng biểu diễn, một cách ký hiệu nhất quán. Đôi khi, một biểu thức được cố tình viết đồng thời trong biểu diễn toạ độ, xung lượng (momentum), trong ký hiệu Dirac. Làm như vậy, chúng tôi hy vọng có thể trợ giúp độc giả trong việc tham khảo tài liệu từ các nguồn khác nhau.

Mặc dù đã cố gắng hạn chế đến mức tối đa, trong cuốn sách không tránh khỏi vẫn còn nhầm lẫn, sai sót. Tác giả sẽ vô cùng biết ơn về những góp ý, phê bình của quý độc giả.

Tác giả chân thành cảm ơn các đồng nghiệp ở Viện Vật lý đã nhiều năm cùng nhau chia sẻ điều kiện làm việc rất khó khăn; cám ơn các anh, chị ở Phòng máy tính, các anh sinh viên đã soạn thảo Latex và vẽ tất cả các hình trong cuốn sách; cám ơn Ban Lãnh đạo Viện Vật lý đã tài trợ một phần kinh phí xuất bản. Tác giả cũng chân thành cám ơn Nhà xuất bản Đại học Quốc gia Hà Nội đã quan tâm, giúp đỡ để cuốn sách sớm ra mắt bạn đọc. Và, cuốn sách không thể có nếu tác giả không nhận được sự đồng cảm, động viên thường xuyên của gia đình mình.

Hà nội, tháng Tám năm 2003

Mục lục

Chương 1

Bài toán một electron

1.1 Electron tự do. Sóng phẳng

Sommerfeld (Sommerfeld 1928) là người đã đề xuất mô hình electron tự do trong kim loại. Trong mô hình này các electron hóa trị được xem là hoàn toàn tự do, bỏ qua tương tác giữa electron với các nguyên tử mạng, cũng như tương tác giữa các electron với nhau. Khi đó, mỗi electron được mô tả bằng một sóng phẳng chuẩn hóa trong thể tích Ω của hệ:

$$\psi(\mathbf{k}.\mathbf{r}) = \Omega^{-1/2} \exp(i\,\mathbf{k}\,\mathbf{r}) \ . \tag{1.1}$$

Ở đây, r là tọa độ, **k** là vectơ sóng mô tả động lượng của electron. Tương ứng, năng lượng của electron là:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{1.2}$$

với m là khối lượng của electron tự do.

Tuy nhiên, khác với electron trong không gian tự do vô hạn, nếu miền Ω là một khối lập phương cạnh L, thì các thành phần của vectơ **k** chỉ có thể nhận các giá trị

$$k_i = \left(\frac{2\pi}{L}\right) n_i \quad ; \quad i = x, y, z \tag{1.3}$$

trong đó n_i là các số nguyên dương hoặc âm.

Như vậy, vectơ k là một số lượng tử đặc trưng cho trạng thái của electron. Nếu tính đến spin thì ta có thêm một số lượng tử nữa, đồng thời, hàm sóng

toàn phần sẽ bằng tích của hàm sóng (1.1) với hàm sóng spin. Ở trạng thái với vectơ sóng k, electron có vận tốc

$$\mathrm{v} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \tag{1.4}$$

và bước-sóng

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} \,. \tag{1.5}$$

Ở trạng thái cơ bản, trong k-không gian, các electron tự do lấp đầy các trạng thái từ thấp lên cao đến một giá trị $k = k_F$ nào đó. Tất cả các trạng thái với $k > k_F$ là trống. Đại lượng k_F được gọi là vectơ sóng Fermi, còn hình cầu bán kính k_F trong k-không gian là hình cầu Fermi. Năng lượng tương ứng $E_F = \hbar^2 k_F^2/2m$ gọi là năng lượng Fermi. Giá trị của vectơ sóng Fermi được hoàn toàn xác định bởi mật độ electron trong không gian, n:

$$k_F = \left(3\pi^2 n\right)^{1/3} \,. \tag{1.6}$$

Ở đây, đã tính đến cả hai phương của spin.

Phổ năng lượng của electron tự do (1.2) là liên tục từ 0 đến vô hạn, $E \geq 0$. Đặc trưng quan trọng nhất của phổ liên tục là mật độ trạng thái, tức là số trạng thái tính trên một đơn vị năng lượng trong một đơn vị thể tích. Với hệ electron tự do 3 chiều mật độ trạng thái bằng

$$\rho(E) = \left(\frac{1}{2\pi^2}\right)\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E} \,. \tag{1.7}$$

Mô hình electron tự do phối hợp với thống kê Fermi-Dirac cho phép giải thích nhiều hiện tượng, chẳng hạn, vì sao đóng góp của electron vào nhiệt dung và độ từ thẩm của kim loại lại nhỏ. Ngoài ra, hàm sóng (1.1) thường được sử dụng như gần đúng bậc không cho các gần đúng tiếp theo.

1.2 Lý thuyết Hartree-Fock

Có thể nói rằng, phương trình Hartree-Fock là khởi điểm, là cơ sở của lý thuyết một electron. Ý tưởng cơ bản của phương trình này là như sau.

Giả sử ta cần tìm trạng thái thấp nhất $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$ của hệ các electron tương tác với Hamiltonian

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i \nabla_i^2 + \sum_i V(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2}\sum_{j\neq i}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} . \qquad (1.8)$$

trong đó $V(\mathbf{r}_i)$ là thế ngoài nào đó (chẳng hạn của các nguyên tử cố định) tác dụng lên electron thứ i, số hạng cuối cùng là tương tác Coulomb giữa các electron mang điện tích e.

Hamiltonian (1.8) không thể giải chính xác với hệ dù chỉ vài electron. Hartree (Hartree 1928) đã đề xuất một quy trình biến phân, trong đó xem Ψ là gần đúng bằng tích các hàm một electron độc lập $\psi_i(\mathbf{r}_i)$:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^{N} \psi_i(\mathbf{r}_i) . \qquad (1.9)$$

Dùng (1.9) làm hàm thử, cực tiểu hóa năng lượng $\langle\Psi|\mathcal{H}|\Psi\rangle / \langle\Psi|\Psi\rangle$, ta nhận được phương trình Hartree cho các hàm một electron

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + V(\mathbf{r}_i) + \sum_{j\neq i} e^2 \int d\mathbf{r}_j \frac{|\psi_j(\mathbf{r}_j)|^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}\right]\psi_i(\mathbf{r}_i) = E_i\,\psi_i(\mathbf{r}_i) . \qquad (1.10)$$

Các năng lượng E_i ở đây có nghĩa như các năng lượng riêng một electron (xem B1.2) và là các tham số biến phân.

Các phương trình Hartree (1.10) chỉ có thể giải bằng phương pháp tự hợp với quy trình như sau: (1) chọn tập các hàm riêng một electron ban đầu $\{\psi_i\}$; (2) dùng tập này tính các thế tương tác Coulomb (số hạng thứ 3 trong vế trái của (1.10)); (3) dùng các thế nhận được tính các ψ_i, nhận được tập $\{\psi_i\}$ mới; (4) xem tập $\{\psi_i\}$ mới nhận được này như tập hàm một electron ban đầu, trở lại bước (1). Quá trình lặp lại tiếp diễn cho đến khi nhận được tập các hàm ψ_i và các thế tự hợp. Thường thì phương trình Hartree cho kết quả gần đúng tốt đối với năng lượng, nhưng chưa tốt đối với hàm sóng.

Quan trọng hơn nữa là, hàm thử (1.9) không thỏa mãn nguyên lý loại trừ Pauli. Thống kê Fermi đòi hỏi hàm riêng của Hamiltonian (1.8) phải là

phản đối xứng, nghĩa là phải đổi dấu khi hoán vị vị trí của hai electron bất kỳ. Dễ thấy rằng, hàm sóng đơn giản thỏa mãn điều kiện này và rất gần với ý tưởng ban đầu của Hartree về tính độc lập thống kê của các đại lượng một electron có dạng định thức Slater:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) & \cdots & \psi_1(\mathbf{r}_N) \\ \psi_2(\mathbf{r}_1) & \cdots & \psi_2(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \psi_N(\mathbf{r}_1) & \cdots & \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} . \quad (1.11)$$

Ở đây, để đơn giản ta xem là trong ký hiệu $\mathbf{r}_i$ bao gồm cả tọa độ không gian lẫn spin.

Sử dụng hàm thử (1.11) Fock (Fock 1930) dẫn ra các phương trình tự hợp đối với các hàm một electron $\psi_i(\mathbf{r}_i)$, gọi là phương trình Hartree-Fock:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \sum_j e^2 \int \frac{|\psi_j(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'\right] \psi_i(r)$$
$$- \sum_j e^2 \left(\int d\mathbf{r}' \frac{\psi_j^*(\mathbf{r})\,\psi_i(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right) \psi_j(\mathbf{r}) = E_i \psi_i(\mathbf{r}) . \quad (1.12)$$

Trong vế trái của phương trình này để phân biệt với số hạng tương tác trực tiếp (số hạng thứ 3 trong ngoặc vuông) đã có trong phương trình Hartree (1.10), số hạng cuối được gọi là tương tác trao đổi. Chú ý là, ở các tổng trong (1.12) ta không cần loại trừ số hạng với $j = i$ vì các số hạng tương ứng trong thế tương tác trực tiếp và thế tương tác trao đổi khi đó vừa đúng loại trừ lẫn nhau.

Việc giải các phương trình Hartree-Fock (1.12) tất nhiên cũng chỉ có thể thực thi bằng cách tự hợp. Phần nặng nhất trong tính toán liên quan với các năng lượng trao đổi. Trong tính toán thực tế, riêng với phần năng lượng này, người ta thường phải chấp nhận thêm một gần đúng bổ sung nào đó, tùy bài toán cụ thể (xem, chẳng hạn, Slater 1951, Kohn and Sham 1965).

1.3 Electron trong tinh thể lý tưởng. Hàm Bloch

Trong tinh thể lý tưởng electron chịu tác dụng của một trường tuần hoàn gây bởi các nguyên tử nút mạng. Bloch (Bloch 1928) chứng minh rằng, nếu thế $V(\mathbf{r})$ là hàm tuần hoàn với chu kỳ mạng, thì phương trình

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\,\psi(\mathbf{r}) \tag{1.13}$$

có lời giải dạng

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \ . \tag{1.14}$$

trong đó $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ là hàm tuần hoàn với cùng chu kỳ như $V(\mathbf{r})$ và được chuẩn hóa trong thể tích Ω của hệ. Hàm sóng (1.14) gọi là hàm Bloch.

Mỗi hàm Bloch (1.14) mô tả một electron, với năng lượng $E(\mathbf{k})$ tương ứng, chuyển động không va chạm trong tinh thể lý tưởng. Mỗi giá trị của $\mathbf{k}$ thỏa mãn điều kiện lượng tử hóa (1.3) xác định một trạng thái electron (chưa kể đến spin). Mặt khác, do sự tương đương về mặt vật lý giữa các vectơ sóng $\mathbf{k}$ và $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{g}$, trong đó g là một vectơ mạng đảo, ta có

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k} + \mathbf{g}) \ , \tag{1.15}$$

nghĩa là E là hàm tuần-hoàn với chu-kỳ của mạng đảo. Và như-vậy, ta có-thể viết $E(\mathbf{k})$ dưới dạng chuỗi Fourier trong k-không-gian:

$$E(\mathbf{k}) = \sum_m C_m e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_m} \ . \tag{1.16}$$

trong đó $m = \{m_1, m_2, m_3\}$ là các chỉ số của vectơ mạng thuận.

Điều quan trọng là, trong tinh thể, do phản xạ Bragg, phổ năng lượng $E(\mathbf{k})$ của electron không còn liên tục như ở electron tự do (1.2), mà phân thành các miền cho phép (gọi là vùng năng lượng) và không cho phép (gọi là khe). Cả hàm sóng lẫn năng lượng không chỉ phụ thuộc vào k, mà vào cả chỉ số vùng n: $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(r)$; $E_n(\mathbf{k})$. Trong mỗi vùng, năng lượng là hàm liên tục của vectơ sóng. Mối quan hệ hàm số $E_n(\mathbf{k})$ gọi là cấu trúc vùng. Việc tìm cấu trúc vùng là bài toán cơ bản, quan trọng nhất, là khởi điểm cho việc tìm hiểu các tính chất điện, quang của vật liệu.

Trong một vùng, nếu hàm $E_n(\mathbf{k})$ có cực tiểu (hoặc cực đại) tại một điểm nào đó (thường là ở các biên của vùng), thì ta có thể gần đúng phân tích:

$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}\left(\frac{\partial^2 E_n(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha\,\partial k_\beta}\right)_0 k_\alpha k_\beta\,, \tag{1.17}$$

trong đó k_α. k_β là các thành phần của k trong hệ toạ độ vuông góc, chỉ số "0" cạnh dấu ngoặc ngụ ý lấy giá trị tại điểm cực trị. Khi viết (1.17) ta đã chọn gốc tính năng lượng và vectơ sóng tương ứng với điểm cực trị. Đưa vào khái niệm tenxơ khối lượng hiệu dụng nghịch đảo $m^{-1}_{\alpha\beta}$, định nghĩa là:

$$m^{-1}_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2 E_n(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha\,\partial k_\beta}\right)_0\,, \tag{1.18}$$

ta thấy hệ thức (1.17) có dạng tương tự như năng lượng của electron tự do (1.2). Thật vậy, với các thành phần chéo

$$m_\alpha^{-1} = \left(\frac{1}{\hbar^2}\right)\left(\frac{\partial^2 E_n(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha^2}\right)_0$$

ta có

$$E_n(k) = \sum_\alpha \frac{\hbar^2 k_\alpha^2}{2\,m_\alpha}\,.$$

Đặc biệt, nếu các m_α^{-1} ($\alpha = x,\, y,\, z$) là như nhau, $m_\alpha^{-1} = (m^*)^{-1}$, thì hệ thức trên trở thành

$$E_n(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\,m^*}\,. \tag{1.19}$$

Hệ thức (1.19) có dạng giống hệt (1.2) chỉ khác ở thay khối lượng electron tự do bằng khối lượng hiệu dụng m^*. Như vậy, trong gần đúng khảo sát electron trong tinh thể biểu hiện ra (phản ứng lại với các tác dụng ngoài như điện trường, từ trường) giống như một electron tự do với khối lượng m^*. Theo định nghĩa (1.18). tùy theo điểm phân tích ứng với cực tiểu hay cực đại của $E_n(\mathbf{k})$ mà khối lượng hiệu dụng có thể là dương (electron ở đáy vùng dẫn trong bán dẫn) hay âm (lỗ trống ở đỉnh vùng hóa trị). Giá trị của m^* cũng có thể rất lớn hơn hoặc nhỏ hơn m. Chẳng hạn, với GaAs có $m^*/m = 0.067$, còn với Si vì mặt đẳng năng là ellipsoid nên có hai khối lượng hiệu dụng thành phần: song song $m_\ell^*/m = 0.916$ và vuông góc $m_t^*/m = 0.19$.

1.4 Cấu trúc vùng năng lượng

Có nhiều phương pháp tính cấu trúc vùng năng lượng $E(\mathbf{k})$ của các vật rắn tinh thể (xem, chẳng hạn, Callaway 1964, Harrison 1980). Các phương pháp này tuy khác nhau về phương diện tính toán, nhưng đều dựa trên một nguyên tắc chung, đó là phân tích hàm riêng ψ_k cần tìm của phương trình (1.13) theo một hệ hàm đầy đủ đã biết nào đó. Hai hệ hàm đơn giản và cơ bản nhất là hệ các hàm sóng electron tự do (sóng phẳng) và hệ các hàm sóng electron trong nguyên tử nút mạng. Hai gần đúng tương ứng gọi là gần đúng electron gần tự do và gần đúng liên kết mạnh.

1.4.1 Gần đúng electron gần tự do

Ý tưởng của gần đúng này là như sau. Nếu biên độ của thế nguyên tử nút mạng $V(\mathbf{r})$ không lớn, ta có thể xem thế này là nhiễu loạn và tìm năng lượng $E(\mathbf{k})$ của (1.13) dưới dạng:

$$E(\mathbf{k}) = E_0(\mathbf{k}) + \langle \mathbf{k}|V|\mathbf{k}\rangle + \sum \frac{|\langle \mathbf{k}|V|\mathbf{k}'\rangle|^2}{E_0(\mathbf{k}) - E_0(\mathbf{k}')}, \tag{1.20}$$

trong đó năng lượng không nhiễu loạn $E_0(\mathbf{k})$ chính là (1.2):

$$E_0(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \tag{1.21}$$

Số hạng bổ chính bậc một, $\langle \mathbf{k}|V|\mathbf{k}\rangle$, không phụ thuộc vào k, ký hiệu là V_0. Với số hạng bổ chính bậc 2, ta chú ý, do tính tuần hoàn của thế $V(\mathbf{r})$ yếu tố ma trận $\langle \mathbf{k}|V|\mathbf{k}'\rangle$ chỉ khác không và bằng $V_{\mathbf{g}}$ nếu $(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ bằng một vectơ mạng đảo g nào đó. Ở đây, $V_{\mathbf{g}}$ là hệ số trong phân tích Fourier

$$V(\mathbf{r}) = \sum V_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{gr}}. \tag{1.22}$$

Thành thử, năng lượng (1.20) trở thành

$$E(\mathbf{k}) = E_0(\mathbf{k}) + V_0 + \sum_{\mathbf{g}\neq 0} \frac{|V_{\mathbf{g}}|^2}{E_0(\mathbf{k}) - E_0(\mathbf{k}+\mathbf{g})}. \tag{1.23}$$

Đây chính là biểu thức cấu trúc vùng $E(\mathbf{k})$ cần tìm trong khuôn khổ gần đúng electron gần tự do. Để biểu thức này có nghĩa, hệ số Fourier $V_{\mathbf{g}}$ phải giảm đủ nhanh khi g tăng để có thể xem là nhỏ bậc một. Đồng thời, mẫu số $E_0(\mathbf{k}) - E_0(\mathbf{k}+\mathbf{g})$ phải đủ lớn. Với k thỏa mãn các điều kiện này, dáng điệu của $E(\mathbf{k})$ chủ yếu quyết định bởi $E_0(\mathbf{k})$ (1.21). Số hạng V_0 chỉ tương đương dịch gốc tính năng lượng, còn số hạng cuối cùng trong (1.23) là nhỏ.

Ngược lại, ở những giá trị của k mà mẫu số $(E_0(\mathbf{k}) - E_0(\mathbf{k}+\mathbf{g}))$ là nhỏ, thì gần đúng trở nên vô nghĩa. Giới hạn $(E_0(\mathbf{k}) - E_0(\mathbf{k}+\mathbf{g})) = 0$ tương đương với điều kiện

$$(1/2)\,g^2 + \mathbf{k}\,\mathbf{g} = 0\,. \qquad (1.24)$$

Đây chính là điều kiện phản xạ toàn phần Bragg (xem, chẳng hạn, Kittel 1986, chương 2) và đồng thời cũng là phương trình các mặt phẳng giới hạn vùng Brillouin. Như vậy, khi đầu mút của vectơ k nằm trên biên của vùng Brillouin, tác dụng của trường tinh thể lên electron trở nên rất mạnh, không còn có thể xem là nhiễu loạn và kết quả (1.23) trở nên vô nghĩa.

Để tìm cấu trúc vùng $E(\mathbf{k})$ trong lân cận biên của vùng Brillouin, ta phân tích:

$$\psi_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{g}} \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}\, e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}} \equiv \sum_{\mathbf{g}} \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}\, e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{g})\mathbf{r}}\,. \qquad (1.25)$$

Dạng phân tích này bảo đảm $\psi_{\mathbf{k}}$ thỏa mãn định lý Bloch.

Thay $\psi_{\mathbf{k}}$ (1.25) vào phương trình (1.13) ta nhận được phương trình đối với các hệ số $\alpha_{\mathbf{g}}$:

$$[E(\mathbf{k}) - E_0(\mathbf{k}+\mathbf{g})]\,\alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{g}} - \sum_{g'} V_{\mathbf{g}+\mathbf{g}'}\,\alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{g}'} = 0\,. \qquad (1.26)$$

Rõ ràng là gần đúng (1.23) tương đương với việc trong phân tích (1.25) và tương ứng trong tổng ở số hạng thứ hai của (1.26) ta xem tất cả các hệ số $\alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}$ là nhỏ, trừ hệ số $\alpha_{\mathbf{k}}$ ($\alpha_{\mathbf{k}} \approx 1$). Khi đó

$$\alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{g}} \approx \frac{V_{\mathbf{g}}}{E_0(\mathbf{k}) - E_0(\mathbf{k}+\mathbf{g})}\,, \quad \mathbf{g} \neq 0. \qquad (1.27)$$

Nhưng, ở lân cận của biên vùng, mẫu số của (1.27) là rất nhỏ, hệ số $\alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}$ có thể trở nên rất lớn, không thể bỏ qua. Chính việc bỏ qua hệ số (1.27), chỉ giữ lại $\alpha_{\mathbf{k}}$ là nguyên nhân vì sao kết quả (1.23) không thể mô tả được cấu trúc $E(\mathbf{k})$ ở gần biên của vùng.

Nếu giữ lại cả hai hệ số $\alpha_{\mathbf{k}}$ và $\alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}$, bỏ qua tất cả các hệ số khác, thì (1.26) sẽ dẫn đến hệ hai phương trình cho hai hệ số này. Điều kiện để hệ phương trình có lời giải, tức là yêu cầu định thức tương ứng bằng không, cho ta một phương trình bậc hai đối với $E(k)$ với lời giải tại biên vùng là

$$E(\mathbf{k}) = E_0(\mathbf{k}) \pm |V_{\mathbf{g}}| \ . \tag{1.28}$$

Như vậy tại biên vùng hàm $E(\mathbf{k})$ bị gián đoạn, trong phổ năng lượng xuất hiện một khe cấm với độ rộng $2|V_{\mathbf{g}}|$. Đây là kết luận rất quan trọng của lý thuyết electron gần tự do, là cơ sở để hiểu các tính chất vật lý của các loại vật liệu khác nhau, trước hết là các kim loại.

Hình 1.1 mô tả định tính cấu trúc vùng năng lượng trong tinh thể một chiều, bao gồm các vùng cho phép xen kẽ các khe cấm. Trong mỗi vùng phụ thuộc $E(\mathbf{k})$ là liên tục. Ở đáy vùng $E(\mathbf{k})$ có dạng (1.23). Các khe xuất hiện ở biên vùng với độ rộng tỷ lệ với biên độ của thế mạng.

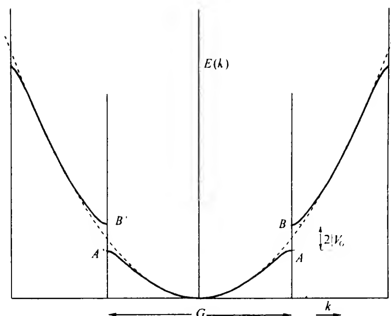
1.4.2 Gần đúng liên kết mạnh

Giả sử $\varphi_s(\mathbf{r} - \mathbf{a}_\ell)$ là hàm sóng electron trong một nguyên tử nằm tại nút mạng $\mathbf{a}_\ell$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi_s + U_s(\mathbf{r})\,\varphi_s = E_s\,\varphi_s. \tag{1.29}$$

trong đó $U_s(\mathbf{r})$ là thế nguyên tử (hay ion) nút mạng. Trong gần đúng liên kết mạnh ta chọn hệ các hàm $\varphi_s(\mathbf{r} - \mathbf{a}_\ell)$ làm gần đúng bậc không và khai triển hàm riêng của phương trình (1.13):

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \sum_\ell e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_\ell}\,\varphi_s(\mathbf{r} - \mathbf{a}_\ell) \ . \tag{1.30}$$



Hình 1.1: Cấu trúc vùng năng lượng trong tinh thể một chiều (sơ đồ vùng mở rộng).

Trọng khối $exp\,(\imath\,\mathbf{k}\,\mathbf{a}_\ell\,)$ bảo đảm cho hàm (1.30) thoả mãn định lý Bloch. Mặt khác, ở gần mỗi nút mạng hàm (1.30) có dáng điệu rất gần với hàm sóng electron trong nguyên tử cô lập.

Với hàm sóng (1.30), ở gần đúng bậc một, ta có giá trị trung bình của năng lượng là

$$E\,(\mathbf{k}) = \int \psi_k^*\,(\mathbf{r})\,\left[\left(-\hbar^2/2m\right)\,\nabla^2 + V\,(r)\right]\,\psi_k\,(\mathbf{r})\,d\mathbf{r} \Big/ \int \psi_k^*\,\psi_k\,d\mathbf{r}\ .$$

Nếu sự phủ nhau giữa các hàm nút lân cận là không quá lớn, thì nhân tử chuẩn hóa ở mẫu số trong biểu thức trên có thể xem bằng đơn vị, còn tử số có thể viết dưới dạng

$$E\,(\mathbf{k}) = E_s + \sum e^{\imath\,\mathbf{k}\,\mathbf{a}_\ell} E_\ell\ , \tag{1.31}$$

trong đó

$$E_\ell = \int \varphi_s^*\,(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\ell)\,[V\,(\mathbf{r}) - U_s\,(\mathbf{r})]\,\varphi_s\,(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}\ . \tag{1.32}$$

Các biểu thức (1.31) và (1.32) cho cấu trúc vùng $E\,(\mathbf{k})$ trong gần đúng liên kết mạnh, trong đó số hạng gần đúng bậc không E_s chính là năng lượng

của electron trong nguyên tử nút mạng cô lập (phương trình (1.29)). Sự phụ thuộc vào k của năng lượng chỉ liên quan với số hạng thứ hai trong vế phải của (1.31). Số hạng này xuất hiện là do sự phủ nhau giữa các hàm sóng electron ở các nút khác nhau. Thường thì sự phủ chỉ là đáng kể nếu các nút là lân cận gần nhất của nhau. Khi đó, tổng theo ℓ ở biểu thức (1.31) sẽ trở nên rất đơn giản.

Để minh họa, xét trường hợp mạng lập phương đơn giản. Nếu chỉ tính đến sự phủ nhau của hàm sóng ở các nút lân cận gần nhất, thì mọi $|\mathbf{a}_\ell| = a$ (hằng số mạng), các E_ℓ (phụ thuộc vào $|\mathbf{a}_\ell| = a$) là như nhau, $E_\ell \equiv A$, và $E(\mathbf{k})$ (1.31) có dạng giản đơn:

$$E(\mathbf{k}) = E_s + 2A(\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z)\,. \qquad (1.33)$$

Ta nhận được một vùng năng lượng đối xứng qua E_s với độ rộng bằng $12|A|$ (nói chung A là âm). Dọc theo mỗi trục của khối lập phương trong k-không gian hàm $E(k_i)$ có cực tiểu tại $k_i = 0$ và cực đại tại biên của vùng Brillouin ($k_i = \pi/a$). Trong một vùng, về dáng điệu, các đường cong $E(k_i)$ có dạng gần giống như trong gần đúng electron gần tự do, nhưng độ cong ở đáy vùng phụ thuộc vào A.

Để nhận được bức tranh chi tiết của cấu trúc vùng ta phải tính đầy đủ các tích phân (1.32) và tổng trong (1.31). Kết quả sẽ rất nhạy cảm với dáng điệu hàm sóng nguyên tử φ_s và giá trị của hằng số mạng a. Hàm sóng φ_s càng định xứ hay a càng lớn thì vùng càng hẹp (trong giới hạn sẽ là một mức nguyên tử). Chi tiết về phương pháp liên kết mạnh và các mở rộng của phương pháp này có thể xem ở Callaway 1964 hay Harrison 1980.

1.5 Cấu trúc vùng khi có trường nhiễu loạn không tuần hoàn

Mục đích của tiết này là xem xét ảnh hưởng của một trường nhiễu loạn không tuần hoàn lên cấu trúc vùng một electron trong tinh thể. Trường nhiễu loạn có thể là trường của một nguyên tử hay ion lạ (tạp chất), trường của lỗ trống (trong điều kiện nhất định dẫn đến các trạng thái liên kết exiton),

điện trường hay từ trường ngoài. Ảnh hưởng của bề mặt hay lệch mạng cũng tương đương như sự có mặt của một trường phụ.

Bài toán về ảnh hưởng của trường nhiễu loạn không tuần hoàn đã được nghiên cứu một cách có hệ thống kể từ sau những công trình rất cơ bản của Wannier (xem Wannier 1959). Ở trên đã chỉ ra rằng, thế mạng tuần hoàn phá huỷ tính liên tục của phổ năng lượng, tách nó thành các vùng cho phép xen kẽ các khe cấm. Giả thiết cơ bản khi giải các bài toán với nhiễu loạn không tuần hoàn là, thế nhiễu loạn phải thay đổi đủ chậm để không gây ra sự chuyển trạng thái electron từ vùng này sang vùng khác. Điểm cần nhấn mạnh nữa là người ta thường không chọn hàm Bloch làm gần đúng bậc không, mà chọn hàm Wannier, định nghĩa như sau:

$$W_n(\mathbf{r}-\mathbf{a}_\ell) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_\ell} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \ , \tag{1.34}$$

trong đó $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ là hàm Bloch. Hệ thức (1.34) có dạng phân tích Fourier, nên ta cũng có hệ thức ngược, phân tích $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ theo hàm Wannier:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\ell W_n(\mathbf{r}-\mathbf{a}_\ell)\, e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_\ell} \ . \tag{1.35}$$

Các hàm Wannier tương ứng với các nút khác nhau là trực giao với nhau:

$$\int d\mathbf{r}\, W_n^*(\mathbf{r}-\mathbf{a}_\ell)\, W_n(\mathbf{r}-\mathbf{a}_{\ell'}) = 0 \quad \text{với} \quad \ell \neq \ell' \ . \tag{1.36}$$

Tại mỗi nút riêng biệt hàm Wannier định xứ mạnh (có cực đại nhọn).

Trở lại bài toán electron trong tinh thể khi có nhiễu loạn không tuần hoàn $U(\mathbf{r})$. Phương trình Schrödinger tương ứng là

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\right]\Psi_I(\mathbf{r}) = E_I \Psi_I(\mathbf{r}) \ . \tag{1.37}$$

Lời giải Ψ_I có thể tìm dưới dạng

$$\Psi_I(\mathbf{r}) = \sum_{n,\ell} f_n^{(I)}(\mathbf{a}_\ell)\, W_n(\mathbf{r}-\mathbf{a}_\ell) \ , \tag{1.38}$$

trong đó n là chỉ số vùng, $\mathbf{a}_\ell$ là vectơ vị trí của nút ℓ. Tương ứng với mỗi vùng, tức là mỗi loại hàm địa phương W_n, có một hàm bao f_n. Nếu thế $U(\mathbf{r})$ thay đổi chậm trên khoảng cách cỡ hằng số mạng, thì từ (1.37) và (1.38) ta nhận được phương trình đối với các hàm bao:

$$E_n(-i\nabla) f_n^{(l)}(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) f_n^{(l)}(\mathbf{r}) = E_l f_n^{(l)}(\mathbf{r}) \ , \qquad (1.39)$$

trong đó toán tử $E_n(-i\nabla)$ xác định theo hệ thức (1.16) của electron trong tinh thể với $\mathbf{k}$ thay bằng $(-i\nabla)$. Phương trình (1.39) có dạng một phương trình Schrödinger với $f_n(\mathbf{r})$ là một hàm liên tục của $\mathbf{r}$ (như một sóng truyền trong tinh thể), $U(\mathbf{r})$ là thế nhiễu loạn không tuần hoàn. Đây là một phương trình tổng quát, có thể giải cho các $U(\mathbf{r})$ khác nhau.

1.5.1 Thế tạp. Trạng thái định xứ

Phương trình (1.39) sẽ có dạng rất đơn giản nếu năng lượng $E_n(\mathbf{k})$ là hàm đối xứng cầu, có cực tiểu (hay cực đại) tại $\mathbf{k} = 0$. Khi đó, trong gần đúng bậc hai ta có $E_n(-i\nabla) = -(\hbar^2/2m^*)\nabla^2$. Thêm vào đó, nếu thế $U(\mathbf{r})$ cũng là đối xứng cầu, thì phương trình (1.39) chính là phương trình sóng của một hạt khối lượng m^* trong trường đối xứng xuyên tâm $U(\mathbf{r})$, một dạng phương trình cơ bản trong cơ học lượng tử (xem, chẳng hạn, Landau and Lifshitz 1960). Năng lượng riêng của phương trình này là các mức gián đoạn nằm ở phía trên (so với trần) hay phía dưới (so với đáy) của vùng không nhiễu loạn, tùy thuộc thế $U(\mathbf{r})$ là đẩy (dương) hay hút (âm).

Để cụ thể, xét trường hợp $U(\mathbf{r})$ là thế Coulomb của một tâm tạp tựa Hydro:

$$U(r) = -\frac{e^2}{\varkappa r} \ , \qquad (1.40)$$

trong đó $\varkappa$ là hằng số điện môi của tinh thể. Trị riêng tương ứng khi đó là các mức gián đoạn (mức tạp):

$$E_\nu = -\frac{m^* e^4}{2\hbar^2 \varkappa^2} \cdot \frac{1}{\nu^2} \ , \qquad \nu = 1, 2, .. \qquad (1.41)$$

tính từ đáy vùng không nhiễu loạn. Ta thấy, khối lượng hiệu dụng m^* (liên quan với dáng điệu $E_n(\mathbf{k})$) càng lớn, cường độ thế nhiễu loạn (đặc trưng

bởi $e^2/\varkappa$) càng mạnh, thì $|E_\nu|$ càng lớn, mức tạp nằm càng sâu trong vùng cấm, trạng thái riêng tương ứng càng định xứ mạnh. Đại lượng

$$|E_1| = \frac{m^* e^4}{2\hbar^2 \varkappa^2}$$

thường được gọi là năng lượng ion hóa tâm tạp. Trong bán dẫn m^* thường nhỏ, còn $\varkappa$ lại lớn, nên năng lượng ion hóa tâm donor tựa Hydro thường nhỏ (tâm nông). Chẳng hạn, với GaAs: $m^* = 0.063m$, $\varkappa = 12.9$, $|E_1|$ chỉ khoảng 0.06 eV.

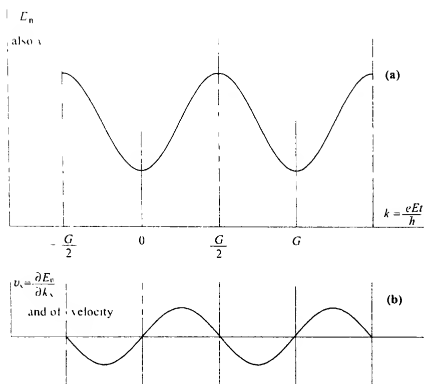
Bức tranh tương tự cũng nhận được cho trường hợp thế $U(\mathrm{r})$ (1.40) mang dấu (+) (tâm acceptor). Khi đó, $E_\nu > 0$ là các mức gián đoạn nằm trong vùng cấm, gần đỉnh vùng hóa trị. Tuy nhiên, ở đây cần lưu ý rằng, ở gần trần vùng hóa trị cấu trúc vùng $E(\mathrm{k})$ thường có dạng phức tạp, cần được xem xét cụ thể (Harrison 1980, Callaway 1964).

Nếu trong hệ có nhiều tâm tạp (nhiễu loạn) thì khi khoảng cách không gian trung bình giữa các tạp là đủ nhỏ, các trạng thái electron định xứ trên các tạp lân cận có thể phủ nhau tạo thành vùng tạp chất. Tính chất dẫn truyền của hệ ở nhiệt độ thấp chủ yếu liên quan với vùng năng lượng này (Mott and Davis 1979, Shklovskii and Efros 1984).

1.5.2 Ảnh hưởng của điện trường

Cấu trúc vùng của một electron trong tinh thể khi có mặt điện trường ngoài tất nhiên có thể nhận được bằng giải trực tiếp Hamiltonian khối lượng hiệu dụng dạng (1.39) với $U(\mathbf{r})$ là thế năng của electron trong điện trường (xem, chẳng hạn, Ziman 1964). Tuy nhiên, ở đây ta có thể lý giải vấn đề một cách đơn giản hơn (Anderson 1997).

Giả sử điện trường $\mathcal{E}$ là yếu, không đủ để gây ra sự chuyển electron giữa các vùng. Trong quá trình chuyển động, do có điện trường, cả động lượng $\hbar\mathrm{k}$ và năng lượng $E_n(\mathrm{k})$ của electron đều thay đổi, nhưng không thể vượt ra ngoài vùng khảo sát. Phương trình chuyển động của electron là $\hbar d\mathrm{k}/dt = e\mathcal{E}$. Từ đây suy ra $\mathrm{k} = \mathrm{k}_0 + e\mathcal{E}t/\hbar$. Trên hình 1.2 mô tả sự thay đổi của $E_n(k)$ theo k (và thời gian t) trong trường hợp tinh thể một



Hình 1.2: Phụ thuộc k (và t) của năng lượng $E_n\ (t)$ trong tinh thể một chiều (a) và thay đổi tương ứng của vận tốc v (b).

chiều. Khi t tăng, k tăng và E_n cũng tăng. Khi k đạt giá trị ứng với biên vùng $k = G/2$ (G là vectơ cơ sở của mạng đảo), E_n cũng đạt tới trần của vùng. Theo thời gian, k tiếp tục tăng, nhưng vì điện trường không đủ để chuyển electron qua khe cấm sang vùng tiếp theo, đối với E_n (k) ta phải áp dụng tính tuần hoàn trong k không gian (1.15): $E_n\ (k) = E_n\ (k \pm G)$, dẫn tới năng lượng vòng lại đáy của vùng và ta có bức tranh dao động như trên hình 1.2(a).

Như vậy, bằng lý giải gần cổ điển giản đơn, ta thấy rằng, điện trường nhiễu loạn dẫn đến sự dao động của năng lượng electron giữa hai ngưỡng vùng với chu kỳ $T = \hbar G/e\mathcal{E}$. Tương ứng, vận tốc nhóm của electron cũng dao động như trên hình 1.2b. Vì vận tốc v đổi dấu tuần hoàn nên cứ sau mỗi chu kỳ, dịch chuyển tổng thể của hạt $x = \int_0^t dtv(t)$ lại bằng không. Đó là lí do vì sao một vùng choán đầy lý tưởng (điện môi) lại không có khả năng mang dòng. Muốn có dòng phải có các hiệu ứng hồi chuyển, phá vỡ chuyển dịch tuần hoàn của hạt, làm cho phân bố hạt trên hai phương +v và −v là khác nhau, dẫn đến chuyển dịch tổng thể khác không. Trong kim

loại hay bán dẫn hiện tượng hồi chuyển chủ yếu liên quan với tán xạ của electron lên các đối tượng như tâm tạp hay phonon. Thông thường, thời gian chuyển động tự do trung bình (giữa hai tán xạ liên tiếp) của electron trong tinh thể là cỡ $10^{-11}s$. Trong khi đó, nếu hằng số mạng là vài $\overset{o}{A}$, cường độ điện trường khoảng $10^3 - 10^4 V/cm$ thì chu kỳ dao động của năng lượng là $T \approx 10^{-8}s$, rất lớn hơn khoảng thời gian trung bình giữa hai tán xạ. Đây là lí do vì sao sự dao động của năng lượng electron trong điện trường nhiễu loạn thường không thể hiện ra đủ rõ để có thể quan sát được.

1.5.3 Electron trong từ trường

Trong từ trường đồng nhất B, hướng theo trục z, Hamiltonian khối lượng hiệu dụng của electron trong tinh thể có dạng

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m^*}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 .$$

Lời giải riêng của Hamiltonian này là (Laudau and Lifshitz 1960):

$$E = E_0 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right) , \quad n = 0, 1, ... \tag{1.42}$$

trong đó E_0 liên quan với gốc tính năng lượng trong vùng khảo sát, $\omega_c = |e|\, B/m^*c$. Số hạng thứ hai trong vế phải của (1.42) là động năng của electron theo phương của từ trường. Theo phương này từ trường không ảnh hưởng đến chuyển động của electron, năng lượng không bị lượng tử hóa. Số hạng cuối trong (1.42) tương ứng với chuyển động của electron trong mặt phẳng vuông góc với trường, ở đây năng lượng bị lượng tử hóa thành các mức gián đoạn với giãn cách $\hbar\omega_c \propto B$, gọi là các mức Landau.

Như vậy, từ trường nhiễu loạn dẫn đến sự lượng tử hóa năng lượng electron thành các mức Landau và từ đó dẫn đến nhiều hiệu ứng quan trọng, trong đó có hiệu ứng Hall lượng tử (Klitzing *et al.* 1980). Ảnh hưởng của hiệu ứng tách mức Landau càng rõ, nếu nhiệt độ càng thấp, khi khoảng cách giữa hai mức Landau lân cận $\hbar\omega_c = e\hbar B/m^*c$ rất lớn hơn năng lượng nhiệt $k_B T$.

1.6 Độ dẫn điện

Phương pháp hàm Green đặc biệt hiệu quả để mô tả các tính chất dẫn truyền của vật liệu, trong đó trước hết là tính dẫn điện. Độ dẫn điện của vật liệu phụ thuộc trực tiếp vào cấu trúc vùng. Có hai cách mô tả độ dẫn điện: hình thức luận Boltzmann và công thức Kubo-Greenwood. Theo cách thứ nhất, trường tán xạ làm thay đổi vectơ sóng của electron, dẫn đến sự khác nhau trong phân bố electron trên hai chiều dọc theo phương điện trường (xem, chẳng hạn, Kittel 1986, Ziman 1964). Hình thức luận Boltzmann chỉ đúng trong giới hạn tán xạ yếu. Công thức Kubo-Greenwood (Kubo 1956, Greenwood 1958), xuất phát từ chính trạng thái riêng của electron trong trường tán xạ, là tổng quát hơn và có thể sử dụng rộng rãi trong cả các hệ có cấu trúc tinh thể cũng như các hệ không trật tự (Mott 1974).

1.6.1 Khái niệm độ dẫn điện

Khi có điện trường $\mathcal{E}$, trong hệ xuất hiện dòng điện với mật độ j. Độ dẫn điện được định nghĩa là hệ số trong phần phụ thuộc tuyến tính của j vào $\mathcal{E}$:

$$j_\alpha(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty d\tau \int d\,\mathbf{r}' \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau)\, \mathcal{E}_\beta(\mathbf{r}', t-\tau) \ . \tag{1.43}$$

Ở đây, α, β ký hiệu các thành phần trong hệ toạ độ vuông góc, tổng được lấy theo chỉ số lặp lại β. Để đơn giản, ta giả thiết cả $\mathcal{E}$ lẫn j đều nằm trên phương x. Khi đó ta chỉ phải tính σ_{xx} (sau này sẽ bỏ qua các chỉ số cho gọn). Việc mở rộng tính toán cho các thành phần $\sigma_{\alpha\beta}$ khác là rất đơn giản.

Thường thì cả $\mathcal{E}$ lẫn j thay đổi không đáng kể trên khoảng cách mà ta quan tâm. Khi đó, sau khi đưa $\mathcal{E}$ ra khỏi dấu tích phân theo r$'$ rồi trung bình theo r, ta có thể viết lại (1.43) dưới dạng

$$j\ (t) = \int_0^\infty d\,\tau\, \sigma(\tau)\, \mathcal{E}(t-\tau) \ , \tag{1.44}$$

trong đó

$$\sigma(\tau) = \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{r}\, d\mathbf{r}' \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) \ . \tag{1.45}$$

Biến đổi Fourier của (1.45) cho dạng phụ thuộc tần số của độ dẫn:

$$\sigma(\omega) = \int_0^{\infty} d\tau \sigma(\tau) e^{i\omega\tau} . \tag{1.46}$$

Trong trường hợp, khi điện trường có dạng

$$\mathcal{E}(t) = F e^{-i\omega t} + F^* e^{i\omega t} , \tag{1.47}$$

thì theo (1.44) và (1.46), ta có

$$j(t) = \sigma(\omega) F.e^{-i\omega t} + \sigma(-\omega) F^* e^{i\omega t} . \tag{1.48}$$

Vì mật độ dòng j phải là một đại lượng thực nên từ $j^* = j$ và với $j(t)$ ở (1.48), suy ra

$$\sigma(-\omega) = \sigma^*(\omega) . \tag{1.49}$$

Hệ thức này ngụ ý, phần thực của độ dẫn, $\sigma_1 = Re\{\sigma\}$, là hàm chẵn của tần số ($\sigma_1(\omega) = \sigma_1(-\omega)$), còn phần ảo, $\sigma_2 = Im\{\sigma\}$, là hàm lẻ ($\sigma_2(-\omega) = -\sigma_2(\omega)$). Giữa phần thực $\sigma_1(\omega)$ và phần ảo $\sigma_2(\omega)$ có hệ thức (Economou 1983):

$$\sigma_1(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int \frac{d\omega' \sigma_2(\omega')}{\omega' - \omega} , \tag{1.50}$$

$$\sigma_2(\omega) = -\frac{1}{\pi} P \int \frac{d\omega' \sigma_1(\omega')}{\omega' - \omega} + \frac{A}{\omega} , \tag{1.50'}$$

trong đó P ngụ ý tích phân theo nghĩa trị chính (xem B1.3), iA là thặng dư của $\sigma(\omega)$ tại $\omega = 0$ (nếu có). Nhờ các hệ thức này ta chỉ cần tính một trong hai đại lượng, σ_1 hoặc σ_2.

Do tính nhân quả, $\sigma(\tau)$ chỉ khác không với $\tau \geq 0$ (xem định nghĩa (1.43)). Sử dụng điều kiện này, từ (1.46) suy ra rằng, hàm $\sigma(\omega)$ là giải tích khắp nơi trong bán mặt phẳng phức trên, $Im\{\omega\} \geq 0$, trong đó có thể loại trừ điểm $\omega = 0$.

1.6.2 Công thức Drude

Lý thuyết đơn giản nhất về phản ứng của hệ đối với một điện trường ngoài biến đổi là mô hình Drude (Drude 1900). Giả thiết cơ bản của mô hình này là xem electron là tự do. Khi có điện trường ngoài $F.e^{\imath\omega t}$, vận tốc của electron thay đổi tuần hoàn với cùng tần số ω. Giả sử trong quá trình chuyển động, ngoài điện trường, electron còn chịu một lực "ma sát" $-m\,v/\tau$, mà trong đó m là khối lượng, v là vận tốc của electron, và τ có thứ nguyên thời gian (thời gian hồi chuyển). Phương trình chuyển động Newton có dạng

$$-i\,\omega\,m\,v = -\frac{m\,v}{\tau} + e\,F\,. \tag{1.51}$$

Theo định nghĩa, mật độ dòng điện là $j = nev$. Với v rút ra từ (1.51) ta có thể viết j dưới dạng $j = \sigma\,(\omega)\,F$, với

$$\sigma\,(\omega) = \frac{n\,e^2\tau}{m\,(1 - i\,\omega\,\tau)}\,. \tag{1.52}$$

Đây là công thức nổi tiếng Drude. Hai trường hợp giới hạn của nó là

$$\sigma\,(0) = \frac{n\,e^2\tau}{m} \tag{1.53}$$

đối với dòng không đổi, và

$$\sigma\,(\omega) \xrightarrow[\omega\to\infty]{} i\frac{n\,e^2}{m\,\omega} \tag{1.54}$$

với trường hợp tần số cao.

Công thức Drude được sử dụng rất rộng rãi, mô tả tốt nhiều kết quả thực nghiệm. Tuy nhiên, ý nghĩa của thời gian τ cũng như cách xác định thời gian này chỉ có thể tìm thấy trong một lý thuyết hoàn thiện hơn, đó là hình thức luận Boltzmann.

1.6.3 Hình thức luận Boltzmann

Tán xạ làm thay đổi vectơ sóng của electron, $\mathbf{k} \to \mathbf{k}'$. Gọi $f_0\,(\mathbf{k})$ là hàm phân bố Fermi khi không có điện trường, thì khi có điện trường đồng nhất

$\mathcal{E}$ hàm phân bố có thể biểu diễn dưới dạng:

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) - \frac{\partial f_0}{\partial E} \cdot e\,\tau(\mathbf{k})(\mathbf{v}\,\mathcal{E}) \ , \tag{1.55}$$

trong đó E là năng lượng, v là vận tốc nhóm của electron. Đại lượng $\tau(\mathbf{k})$ gọi là thời gian hồi chuyển động lượng (momentum), được định nghĩa qua xác suất $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ để trong một đơn vị thời gian electron chuyển từ trạng thái $\mathbf{k}$ sang $\mathbf{k}'$:

$$\tau^{-1}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')(1 - \cos\theta) \tag{1.56}$$

với θ là góc giữa $\mathbf{k}$ và $\mathbf{k}'$.

Theo định nghĩa, mật độ dòng là:

$$\mathrm{j} = -\frac{2e}{8\pi^3}\int \mathbf{v} f(\mathbf{k})\, d\mathbf{k} \ . \tag{1.57}$$

Thay vào đây $f(\mathbf{k})$ từ (1.55), ta có

$$\mathrm{j} = -\frac{e^2}{4\pi^3}\int \tau(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathbf{v}(\mathbf{v}\mathcal{E})\, d\mathbf{k} \ .$$

Với thành phần α của mật độ dòng j trong hệ trục vuông góc ta có thể viết

$$j_\alpha = \sum_\beta \sigma_{\alpha\beta}\, \mathcal{E}_\beta \ , \tag{1.58}$$

trong đó tenxơ độ dẫn điện $\sigma_{\alpha\beta}$ được xác định bằng

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{e^2}{4\pi^3}\int \tau(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial E} v_\alpha\, v_\beta\, d\mathbf{k} \ . \tag{1.59}$$

Ở đây, vận tốc nhóm $\mathrm{v} = (1/\hbar)\,\partial E(\mathbf{k})/\partial\mathbf{k}$, $\tau(\mathbf{k})$ là thời gian hồi chuyển (1.56). Một khi đã biết cấu trúc vùng $E(\mathbf{k})$, thì việc tính σ quy về tính $\tau(\mathbf{k})$ với từng cơ chế tán xạ cụ thể. Số hạng $\cos\theta$ trong (1.56) liên quan với việc tính đến sự bất đẳng hướng của tán xạ (tán xạ góc nhỏ thường ảnh hưởng đến điện trở yếu hơn tán xạ góc lớn!). Nếu tán xạ là đẳng hướng (chẳng hạn tán xạ tâm điểm) thì sau khi lấy trung bình, số hạng $\cos\theta$ sẽ không còn nữa. Một cách gần đúng, τ có giá trị như khoảng thời gian chuyển động tự do trung bình của electron và liên quan với quãng đường tự do trung bình ℓ bằng hệ thức $v_F\tau = \ell$, trong đó v_F là vận tốc Fermi.

1.6.4 Công thức Kubo-Greenwood

Ioffe và Regel (Ioffe and Regel 1960) chỉ ra rằng hình thức luận Boltzmann trở nên vô nghĩa khi $k\ell \lesssim 1$ (tức là khi ℓ cỡ hằng số mạng), vì khi đó **k** không còn là một số lượng tử tốt nữa. Điều này thường xảy ra ở các vật liệu không có cấu trúc tinh thể, bán dẫn pha tạp, tinh thể lỏng ... Với các trường hợp này, thay cho hình thức luận Boltzmann ta phải dùng công thức Kubo-Greenwood. Dưới đây, ta dẫn ra công thức tổng quát này.

Công suất của mật độ dòng j trong điện trường $\mathcal{E}$ trong thể tích Ω là $P = \Omega\left(\overline{\mathcal{E} j}\right)$. Ở đây, ta quy ước $\mathcal{E}$ và j đều dọc theo trục x, gạch ngang ở trên ngụ ý trung bình theo thời gian. Sử dụng $\mathcal{E}$ (1.47) và j (1.48) với chú ý $\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + i\sigma_2(\omega)$, trong đó $\sigma_1(\omega)$ là hàm chẵn còn $\sigma_2(\omega)$ là hàm lẻ, sau khi trung bình theo thời gian t, ta có

$$P = 2\Omega\, |F|^2 \sigma_1(\omega) \ . \tag{1.60}$$

Mặt khác, công suất P có thể tính bằng

$$P = \sum_{\alpha,\beta} E_{\beta\alpha}\, p_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} E_{\beta\alpha}\left(p_{\alpha\beta} - p_{\beta\alpha}\right) \ . \tag{1.61}$$

trong đó $E_{\beta\alpha} = \hbar\,\omega_{\beta\alpha} = E_\beta - E_\alpha$ là năng lượng do hệ hấp thụ khi trạng thái electron chuyển từ $|\alpha\rangle$ sang $|\beta\rangle$ dưới tác dụng của điện trường; $p_{\alpha\beta}$ là bước (rate) chuyển. Trong tổng (1.61) đã bao hàm cả spin. Đại lượng $p_{\alpha\beta}$ có thể xác định bằng:

$$p_{\alpha\beta} = f_\alpha\left(1 - f_\beta\right) W_{\alpha\beta} \ . \tag{1.62}$$

Ở đây, $f_\alpha \equiv f\left(E_\alpha\right)$ là hàm phân bố Fermi, còn xác suất $W_{\alpha\beta}$ có thể tính theo quy tắc vàng Fermi:

$$W_{\alpha\beta} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle\alpha\left|H_1\right|\beta\rangle\right|^2 \delta\left(E_\beta - E_\alpha\right) \tag{1.63}$$

với nhiễu loạn H_1 trong bài toán đang khảo sát là

$$H_1(t) = e\,x\,\mathcal{E}(t) \ . \tag{1.64}$$

Việc xem $H_1(t)$ (1.64) là nhiễu loạn ngụ ý ta đang làm việc trong gần đúng tuyến tính.

Đặt (1.62) (1.64) vào (1.61) rồi cân bằng kết quả nhận được với (1.60), ta rút ra

$$\sigma_1(\omega) = \frac{\pi e^2}{\Omega} \sum_{\alpha,\beta} |\langle\alpha|x|\beta\rangle|^2 \omega_{\beta\alpha} (f_\alpha - f_\beta)\, \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\beta\alpha}) .$$

Sử dụng hệ thức $p_x = m\,dx/dt = im[\mathcal{H}.x - x\mathcal{H}]/\hbar$ và do đó $\langle\alpha|p_x|\beta\rangle = im\,\omega_{\beta\alpha}\langle\alpha|x|\beta\rangle$, ta viết lại biểu thức trên của phần thực $\sigma_1(\omega)$ của độ dẫn dưới dạng:

$$\sigma_1(\omega) = \frac{\pi e^2}{\Omega m^2} \sum_{\alpha,\beta} |\langle\alpha|p_x|\beta\rangle|^2 \frac{f_\alpha - f_\beta}{\omega_{\beta\alpha}}\, \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\beta\alpha}) . \qquad (1.65)$$

Phần ảo $\sigma_2(\omega)$ được tính qua $\sigma_1(\omega)$ bằng sử dụng hệ thức (1.50') với chú ý là, hằng số A có thể xác định bằng cách yêu cầu $\sigma_2(\omega)$ thoả mãn giới hạn $i\sigma_2(\omega) \to$ (1.54) khi $\omega \to \infty$. Ta nhận được $A = e^2 n/m$. Kết hợp $\sigma_2(\omega)$ tính được với (1.65) ta nhận được công thức Kubo-Greenwood

$$\begin{aligned}\sigma(\omega) &= \left(\frac{e^2 n}{m} - \frac{e^2}{\Omega m^2}\sum_{\alpha,\beta} |\langle\alpha|p_x|\beta\rangle|^2 \frac{f_\alpha - f_\beta}{\omega_{\beta\alpha}}\right)\frac{i}{\omega + i\delta} \\ &\quad - i\frac{e^2}{\Omega m^2}\sum_{\alpha,\beta} |\langle\alpha|p_x|\beta\rangle|^2 \frac{f_\alpha - f_\beta}{\hbar\omega_{\beta\alpha}} \frac{1}{\omega_{\beta\alpha} - \omega - i\delta}, \quad \delta \to 0^+ .\end{aligned} \qquad (1.66)$$

Số hạng $e^2 n/m$ thường được gọi là phần nghịch từ của độ dẫn. Phần còn lại của $\sigma(\omega)$ (1.66), gọi là phần thuận từ, có thể viết dưới dạng

$$\sigma_p(\omega) = -i\frac{e^2}{\Omega m^2 \hbar\omega} \sum_{\alpha,\beta} |\langle\alpha|p_x|\beta\rangle|^2 \frac{f_\alpha - f_\beta}{\omega_{\beta\alpha} - \omega - i\delta} . \qquad (1.67)$$

Edwards (Edwards 1958) chỉ ra rằng, nếu tán xạ là yếu thì công thức Kubo-Greenwood cho lại chính xác các biểu thức (1.59) với $\tau(k)$ (1.56) trong hình thức luận Boltzmann.

Thảo luận bổ sung và bài tập

B1.1 Với hệ electron tự do hai chiều (two dimensional 2D) và một chiều (one dimensional 1D), tương ứng với (1.6) và (1.7), ta có

$$k_F = \begin{cases} \sqrt{2\pi n} & (2D) \\ \pi n & (1D) \end{cases} \tag{1.68}$$

$$\rho(E) = \begin{cases} m/\pi\hbar^2 & (2D) \\ \left(\sqrt{2m}/2\pi\hbar\right) E^{-1/2} & (1D)\ . \end{cases} \tag{1.69}$$

Tại ngưỡng vùng, $E = 0$, trong khi với ba chiều $\rho(E)$ (1.7) là liên tục, với $2D$ $\rho(E)$ (1.69) là gián đoạn, còn với $1D$ hàm $\rho(E)$ có kỳ dị dạng $1/\sqrt{E}$.

B1.2 Trong các phương trình Hartree hay Hartree-Fock tham số E_i được tính trong sự phụ thuộc vào phân bố trung bình của tất cả các electron $j \neq i$. Do đó, nói một cách chính xác, E_i không phải là năng lượng một electron. Về ý nghĩa của các tham số này Koopmans (Koopmans 1933) đã chứng minh định lý sau (Định lý Koopmans): Nếu giả thiết rằng các hàm sóng một electron không thay đổi khi ta rút ra khỏi hệ khảo sát một electron i bất kỳ, thì hiệu các năng lượng toàn phần trước, $E(N)$, và sau khi rút bớt electron i, $E(N-1)$, sẽ cho chính xác tham số E_i: $E_i = E(N) - E(N-1)$.

B1.3 Để nhận được các hệ thức (1.50) ta phải sử dụng tính giải tích trên nửa mặt phẳng trên của độ dẫn $\sigma(\omega)$ và đồng nhất thức

$$\lim_{y \to 0^+} \frac{1}{x \pm i\, y} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\,\pi\,\delta(x)\ . \tag{1.70}$$

Đồng nhất thức này sẽ thường xuyên sử dụng trong các chương sau.

B1.4 Tìm hàm riêng và trị riêng của phương trình

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2}\,\psi_k = E_k\,\psi_k$$

với điều kiện biên $\psi_k(0) = \psi_k(Na) = 0$, trong đó a là hằng số mạng. N là số nguyên tử trong mạng 1 chiều. Có bao nhiêu giá trị cho phép của k trong vùng Brillouin thứ nhất?

B1.5 Hãy chứng minh định lý Bloch: Nếu thế $V(\mathbf{r})$ là tuần hoàn với chu kỳ mạng thì lời giải của phương trình (1.13) có dạng (1.14)

B1.6 Cho mạng một chiều các nguyên tử với hằng số mạng a. Mỗi nguyên tử nút mạng được biểu diễn bằng một thế delta: $V(x) = aV_0\delta(x)$. Hãy: (a) xác định độ rộng khe năng lượng giữa các vùng trong gần đúng electron gần tự do; (b) tính độ rộng của vùng năng lượng thấp nhất trong gần đúng liên kết mạnh.
Trả lời:
(a) Các khe như nhau với cùng độ rộng $\Delta = 2V_0$.
(b) $W = 4(aV_0)^2 me^{-\alpha a/\hbar^2}$ với $\alpha = -aV_0m/\hbar^2$.

Chương 2

Hàm Green của các phương trình vi phân tuyến tính

Trong Vật lý ta thường phải giải bài toán tìm trường tại điểm r gây bởi một nguồn (điện, nhiệt ...) có kích thước hữu hạn và mật độ $\rho(\mathbf{r}')$ nào đó. Nếu $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ là trường tại r gây bởi một nguồn điểm tại r′, còn trường cũng tại r gây bởi toàn bộ nguồn với mật độ $\rho(\mathbf{r}')$ là bằng tích phân của $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}')$ trên toàn bộ miền phân bố của nguồn, thì hàm $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ chính là hàm Green (Green 1828).

Hoặc, bài toán điều kiện biên: nếu $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ là trường tại điểm r nằm ngoài mặt biên trong trường hợp giá trị biên bằng không khắp nơi trừ tại một điểm r′, còn trường cũng tại r trong trường hợp giá trị biên là $\psi(\mathbf{r}')$ nào đó là bằng tích phân của $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\,\psi(\mathbf{r}')$ trên toàn mặt biên, thì $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ cũng là hàm Green.

Hai bài toán trên có sự tương đồng nếu ta xem mặt biên như một nguồn có phân bố tương ứng với giá trị biên. Phương trình trường khi có nguồn là một phương trình vi phân không đồng nhất, trong đó số hạng không đồng nhất không chứa trường, mà chỉ chứa mật độ nguồn, (ví dụ, phương trình Poisson $\nabla^2\phi = 4\pi\rho$). Nếu không có nguồn thì phương trình là đồng nhất (ví dụ, phương trình Laplace $\nabla^2\phi = 0$). Tương tự, với bài toán biên: nếu giá trị biên không bằng không khắp nơi trên mặt biên trong bài toán Dirichlet (hoặc thành phần pháp tuyến không bằng không khắp nơi trong bài toán Neuman), thì ta có phương trình không đồng nhất (xem, chẳng hạn, Morse and Feshbach 1953).

Nói chung, hàm Green là lời giải của phương trình vi phân đồng nhất khắp nơi trừ tại một điểm (nguồn điểm). Trong chương này, trước hết, chúng ta xem xét các đặc trưng toán học cơ bản của hàm Green của các phương trình vi phân tuyến tính.

2.1 Hàm Green không phụ thuộc thời gian

2.1.1 Định nghĩa

Hàm Green không phụ thuộc thời gian là lời giải của phương trình vi phân không đồng nhất dạng

$$[\eta - \mathcal{L}(\mathbf{r})]\, G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \ , \tag{2.1}$$

thỏa mãn điều kiện biên nào đó trên mặt S thuộc miền Ω chứa $\mathbf{r}$, $\mathbf{r}'$. Trong phương trình này η là một biến phức, còn $\mathcal{L}(\mathbf{r})$ là một toán tử vi phân tuyến tính, Hermite, không phụ thuộc thời gian.

Phương trình (2.1) có thể viết lại trong kí hiệu Dirac (xem Phụ lục A):

$$(\eta - \mathcal{L})\, G(\eta) = 1. \tag{2.1'}$$

Toán tử $\mathcal{L}$ có các hàm riêng $|\phi_n\rangle$ và trị riêng E_n

$$\mathcal{L}\, |\phi_n\rangle = E_n\, |\phi_n\rangle\,. \tag{2.2}$$

Các hàm riêng $|\phi_n\rangle$ thỏa mãn cùng điều kiện biên như hàm Green G. Chúng lập thành một hệ hàm trực giao:

$$\langle \phi_n \,|\, \phi_m \rangle = \delta_{n\,m} \tag{2.3}$$

và đầy đủ

$$\sum_n |\phi_n\rangle\, \langle\phi_n| = 1\ . \tag{2.4}$$

Lưu ý rằng, tổng theo n trong (2.4), cũng như ở các biểu thức tương tự sẽ gặp sau này, có thể gồm hai phần: tổng theo phổ gián đoạn và tích phân theo phổ liên tục.

Bây giờ, nếu tất cả các trị riêng của $(\eta - \mathcal{L})$ là khác không, tức là nếu η không thuộc phổ trị riêng của $\mathcal{L}$, thì từ (2.1') và (2.4) có:

$$G(\eta) = \frac{1}{\eta - \mathcal{L}} = \sum_n \frac{1}{\eta - \mathcal{L}} |\phi_n\rangle \langle\phi_n| = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle \langle\phi_n|}{\eta - E_n}. \quad (2.5)$$

Đây chính là hàm Green của phương trình (2.1), trong đó $|\phi_n\rangle$ và E_n là hàm riêng và trị riêng của toán tử $\mathcal{L}$. Nếu $\mathcal{L}$ có cả phổ gián đoạn lẫn liên tục thì như vừa ghi nhận ở trên, dạng cụ thể hơn của (2.5) là:

$$G(\eta) = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle \langle\phi_n|}{\eta - E_n} + \int dE \frac{|\phi_E\rangle \langle\phi_E|}{\eta - E}. \quad (2.6)$$

hay trong r - biểu diễn

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta) = \sum_n \frac{\phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}')}{\eta - E_n} + \int dE \frac{\phi_E(\mathbf{r}) \phi_E^*(\mathbf{r}')}{\eta - E}. \quad (2.7)$$

2.1.2 Tính chất

Trước hết, từ (2.7) ta thấy hàm Green thỏa mãn quan hệ đảo (reciprocity relation):

$$G^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta) = G(\mathbf{r}', \mathbf{r}; \eta^*). \quad (2.8)$$

Xem xét tiếp (2.7). Vì trị riêng của toán tử Hermite $\mathcal{L}$ (E_n trong tổng và E trong tích phân) luôn là thực, các mẫu số trong (2.7) khác không khắp nơi trừ những điểm trên trục thực, mà tại đó η trùng với trị riêng của $\mathcal{L}$. Nói khác, hàm Green $G(\eta)$ giải tích khắp nơi trên mặt phẳng của biến phức η trừ những điểm η trùng với trị riêng của $\mathcal{L}$, tại đó hàm Green có kỳ dị. Xét hai trường hợp ứng với hai loại phổ.

Nếu η trùng với một trị riêng gián đoạn E_n của $\mathcal{L}$, thì theo (2.7), tại điểm η đó hàm Green $G(\eta)$ có một cực đơn giản. Như vậy, ta có thể xác định phổ trị riêng gián đoạn của toán tử $\mathcal{L}$ bằng cách tìm các cực của hàm Green tương ứng. Đây là một trong những kết luận quan trọng nhất trong ứng dụng hàm Green vào các bài toán vật lý chất rắn. Ngoài ra, tại mỗi cực đơn giản $\eta = E_n$, theo (2.7), ta có thặng dư

$$\text{Res}\{G(\eta)\}|_{E_n} = \phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}').$$

hay, với yếu tố chéo

$$\text{Res}\left\{G(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \eta)\right\}|_{E_n} = |\phi_n(\mathbf{r})|^2 ,$$

nghĩa là, thặng dư của hàm Green tại cực đơn giản cho ta thông tin về hàm riêng của $\mathcal{L}$.

Nếu η trùng với giá trị năng lượng bất kỳ trong miền phổ liên tục của $\mathcal{L}$, $\eta = E$, thì hàm $G(\eta)$ cũng không xác định. Tuy nhiên, tại các điểm lân cận trên $\eta_+ = E + i\delta$ và lân cận dưới $\eta_- = E - i\delta$, hàm $G(\eta)$ luôn giải tích, dù δ nhỏ bao nhiêu cũng được ($\delta > 0$). Từ nhận xét này suy ra ta có thể, thay cho $G(E)$, định nghĩa các hàm giới hạn:

$$G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \lim_{\delta \to 0_+} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E + i\delta) , \tag{2.9}$$

$$G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \lim_{\delta \to 0_+} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E - i\delta) . \tag{2.10}$$

Hai hàm giới hạn này đều tồn tại, nhưng không bằng nhau. Điều này cũng có nghĩa là, ở hàm Green $G(\eta)$ có một cắt nhánh (branch cut) dọc theo trục thực. Mặt khác, ta biết, các trạng thái ứng với phổ liên tục thường là các trạng thái lan truyền. Như vậy, trong khi cực đơn giản của hàm Green mô tả trị riêng gián đoạn tương ứng trạng thái định xứ, thì cắt nhánh mô tả phổ liên tục tương ứng trạng thái lan truyền.

Từ hệ thức đảo (2.8) và các định nghĩa (2.9), (2.10) ta có:

$$G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \left[G^+(\mathbf{r}', \mathbf{r}; E)\right]^* \tag{2.11}$$

hay

$$\text{Re}\left\{G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)\right\} = \text{Re}\left\{G^+(\mathbf{r}', \mathbf{r}; E)\right\} , \tag{2.12}$$

$$\text{Im}\left\{G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)\right\} = -\text{Im}\left\{G^+(\mathbf{r}', \mathbf{r}; E)\right\} . \tag{2.13}$$

Đồng thời với các hàm giới hạn $G^\pm$, ta cũng sẽ quan tâm đến đại lượng

$$\tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) - G^-(\mathbf{r}', \mathbf{r}'; E) . \tag{2.14}$$

Theo (2.12) và (2.13),

$$\tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = 2i\text{Im}\left\{G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)\right\} = -2i\text{Im}\left\{G^-(\mathbf{r}', \mathbf{r}'; E)\right\} . \tag{2.14'}$$

Sử dụng các hệ thức (2.5), (2.9), (2.10) và đồng nhất thức (1.70), ta có thể viết tiếp

$$\tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -2\pi i \sum_n \delta(E - E_n)\, \phi_n(\mathbf{r})\, \phi_n^*(\mathbf{r}') \ . \tag{2.15}$$

Các hàm $G^{\pm}$ và $\tilde{G}$ định nghĩa ở trên có quan hệ trực tiếp với mật độ trạng thái, là đại lượng quan trọng nhất trong vật lý chất rắn. Để thấy điều này, ta sử dụng đồng nhất thức (1.70), viết các yếu tố chéo của $G^{\pm}$ dưới dạng

$$\begin{aligned} G^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) &= P \sum \frac{\phi_n(\mathbf{r})\, \phi_n^*(\mathbf{r})}{E - E_n} \\ &\mp i\pi \sum_n \delta(E - E_n)\, \phi_n(\mathbf{r})\, \phi_n^*(\mathbf{r}) \ , \end{aligned} \tag{2.16}$$

trong đó P là ký hiệu trị chính.
Hay, sau khi tích phân theo **r**

$$\mathrm{Tr}\, G^{\pm}(E) = P \sum_n \frac{1}{E - E_n} \mp i\pi \sum_n \delta(E - E_n) \ . \tag{2.17}$$

Tr là ký hiệu lấy vết $\mathrm{Tr} \equiv \sum_n \langle n| \ldots |n\rangle$ với $|n\rangle$ là một hệ đầy đủ nào đó.

Theo định nghĩa, đại lượng $N(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$ chính là mật độ trạng thái (số trạng thái trong một đơn vị năng lượng). Như vậy, hệ thức (2.17) cho phép xác định mật độ trạng thái $N(E)$ qua các hàm giới hạn G^+ hay G^-:

$$N(E) = \mp \frac{1}{\pi}\, \mathrm{Im} \left\{ \mathrm{Tr}\, G^{\pm}(E) \right\} \ . \tag{2.18}$$

Đối với mật độ trạng thái trên một đơn vị thể tích $\rho(\mathbf{r}, E)$, ngụ ý $\int \rho(\mathbf{r}, E)\, d\mathbf{r} = N(E)$, thì dễ thấy

$$\rho(\mathbf{r}, E) = \sum_n \delta(E - E_n)\, \phi_n(\mathbf{r})\, \phi_n^*(\mathbf{r}) \ . \tag{2.19}$$

So sánh (2.19) với (2.16), ta có

$$\rho(\mathbf{r}, E) = \mp \frac{1}{\pi}\, \mathrm{Im}\, G^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) \ . \tag{2.20}$$

Hay, theo (2.14'):

$$\rho(\mathbf{r}, E) = -\frac{1}{2\pi i}\,\tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E)\ . \tag{2.21}$$

Các hệ thức (2.18) (2.21) biểu diễn mật độ trạng thái qua các hàm $G^{\pm}$ hay $\tilde{G}$. Đó là những hệ thức rất quan trọng và sẽ thường xuyên sử dụng trong các chương sau.

Hơn nữa, chính hàm Green $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta)$ cũng có thể biểu diễn qua $\tilde{G}$ hay $G^{\pm}$. Thật vậy, sử dụng (2.5), sau đó (2.15), ta viết được:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta) &= \sum_n \frac{\phi_n(\mathbf{r})\,\phi_n^*(\mathbf{r}')}{\eta - E_n} \\ &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dE \sum_n \delta(E - E_n)\,\frac{\phi_n(\mathbf{r})\,\phi_n^*(\mathbf{r}')}{\eta - E} \\ &= \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dE\,\frac{\tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)}{\eta - E}\ . \end{aligned} \tag{2.22}$$

Theo (2.21), từ (2.22) ta có yếu tố chéo của hàm Green:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \eta) = \int_{-\infty}^{\infty} dE\,\frac{\rho(\mathbf{r}, E)}{\eta - E} \tag{2.23}$$

Bởi vì $\rho(\mathbf{r}, E)$ được tính qua $G^{\pm}$ theo (2.20), các hệ thức (2.22) và (2.23) cho phép ta xác định $G(\eta)$ một khi biết $G^{\pm}(E)$ hay $\tilde{G}(E)$.

Ta cũng chú ý thêm rằng, tại các điểm η nằm trên trục thực, $\eta \equiv Re\{\eta\} = \varepsilon$, nhưng không trùng với trị riêng của toán tử $\mathcal{L}$, $\varepsilon \neq \{E_n, E\}$, hàm Green $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon)$ là giải tích và vì $\eta = \varepsilon$ là thực nên hệ thức đảo (2.8) khi đó có dạng

$$G^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) = G(\mathbf{r}', \mathbf{r}; \varepsilon)\ ,$$

ngụ ý $\tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon)$ là Hermite. Riêng với yếu tố chéo thì

$$G^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \varepsilon) = G(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \varepsilon)\ ,$$

nghĩa là, tại các điểm trên trục thực mà không trùng với trị riêng của $\mathcal{L}$, yếu tố chéo của hàm Green là thực.

Cuối cùng, về mặt toán học, một khi đã biết hàm Green $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta)$ của phương trình (2.1), ta có thể biết lời giải của phương trình vi phân không đồng nhất tổng quát tương ứng:

$$[\eta - \mathcal{L}(\mathbf{r})]\,\varphi(\mathbf{r}, \eta) = f(\mathbf{r}), \tag{2.24}$$

trong đó số hạng không đồng nhất $f(\mathbf{r})$ là một hàm đã cho, còn hàm phải tìm $\varphi(\mathbf{r}, \eta)$ thỏa mãn cùng điều kiện biên trên mặt S như hàm G ở (2.1). Thực hiện các biến đổi tương tự như đã làm với (2.1) ta dễ thấy lời giải của (2.24) có dạng:

$$\varphi(\mathbf{r}, \eta) = \begin{cases} \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta)\, f(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}'; & \text{nếu } \eta \neq E_n \\ \int G^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta)\, f(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}' + \varphi_0(\mathbf{r}, \eta); & \text{nếu } \eta = E\,. \end{cases} \tag{2.25}$$

Ở đây, E_n hay E tương ứng thuộc phổ trị riêng gián đoạn hay liên tục của L, $\varphi_0(\mathbf{r}, \eta)$ là lời giải tổng quát của phương trình vi phân đồng nhất tương ứng với (2.24). Tại các điểm $\eta = E_n$ phương trình (2.24) không có lời giải trừ trường hợp hàm $f(\mathbf{r})$ trực giao với tất cả các hàm riêng ứng với E_n. Về ý nghĩa vật lý, nếu xem hàm $\varphi(\mathbf{r})$ mô tả phản ứng của hệ đối với nguồn $f(\mathbf{r}')$, thì hàm Green $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ mô tả phản ứng của cũng hệ đó nhưng đối với một nguồn điểm tại $\mathbf{r}'$. Và, lời giải (2.25) ngụ ý, phản ứng của hệ với một nguồn $f(\mathbf{r})$ nào đó luôn có thể biểu diễn như tổng các phản ứng với các nguồn điểm phân bố theo hàm $f(\mathbf{r})$. Cũng chú ý rằng, theo hệ thức đảo (2.8) thì phản ứng tại $\mathbf{r}$ đối với nguồn điểm tại $\mathbf{r}'$ bằng phản ứng tại $\mathbf{r}'$ đối với nguồn điểm tại $\mathbf{r}$.

2.1.3 Ví dụ

Hãy tìm hàm Green của phương trình (2.1) với $\mathcal{L} = -\nabla^2$. Miền Ω là toàn bộ không gian thực. Điều kiện biên là các hàm riêng của $\mathcal{L}$ phải hữu hạn ở vô cùng.

Giải. Toán tử $\mathcal{L}(r) = -\nabla^2$ có hàm riêng

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(i\,\mathbf{k}\,\mathbf{r}) \tag{2.26}$$

với trị riêng phổ liên tục

$$E = k^2 \,. \tag{2.27}$$

Hàm Green phải tìm, thỏa mãn phương trình

$$\left(\eta + \nabla^2\right) G\left(\mathbf{r},\, \mathbf{r}';\, \eta\right) = \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}'\right) \;, \tag{2.28}$$

theo (2.5), có dạng

$$G\left(\mathbf{r},\, \mathbf{r}';\, \eta\right) = \sum_k \frac{\langle \mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}|\mathbf{r}'\rangle}{\eta - k^2} = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{\eta - k^2} \,.$$

Ở đây, ta xét trường hợp hệ ba chiều. Đặt $\rho = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$; θ là góc giữa $\mathbf{k}$ và ρ, ta viết lại biểu thức trên

$$\begin{aligned} G\left(\mathbf{r},\mathbf{r}';\, \eta\right) &= \frac{2\pi}{(2\pi)^3} \int \frac{k^2\, dk}{\eta - k^2} \int d\theta\, \sin\theta\, e^{ik\rho\cos\theta} \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^2\, dk}{\eta - k^2}\, \frac{e^{ik\rho} - e^{-ik\rho}}{ik\rho} \\ &= \frac{1}{4i\pi^2\rho} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k\, dk}{\eta - k^2}\, e^{ik\rho} \,. \end{aligned} \tag{2.29}$$

Hàm dưới dấu tích phân có cực tại $k = \pm\sqrt{\eta}$. Nếu η không phải là thực và không âm thì trong hai cực sẽ có một thuộc nửa mặt phẳng trên với phần ảo dương, $\mathrm{Im}\{\sqrt{\eta}\} > 0$, còn cực kia nằm ở nửa mặt phẳng dưới với phần ảo âm. Tích phân trong (2.28) có thể lấy chẳng hạn theo vòng kín bao nửa mặt phẳng trên. Khi đó, vì thặng dư của hàm dưới dấu tích phân tại cực đơn giản $\sqrt{\eta}$ bằng $-\exp\left(i\sqrt{\eta}\,\rho\right)/2$, ta có

$$\begin{aligned} G\left(\mathbf{r},\, \mathbf{r}';\, \eta\right) &= \frac{1}{4i\pi^2\rho}.2\pi i\left(-\frac{e^{i\sqrt{\eta}\rho}}{2}\right) \\ &= -\frac{1}{4\pi\left|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\right|} \exp\left(i\sqrt{\eta}\,\left|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\right|\right) \,. \end{aligned} \tag{2.30}$$

Đây chính là hàm Green phải tìm $\left(\mathrm{Im}\{\sqrt{\eta}\} > 0\right)$.

Nếu η trùng với trị riêng của ∇^2 (tức là $\eta = E$, thực, không âm), thì hàm G không xác định. Các hàm giới hạn (2.9) và (2.10) khi đó là

$$G^{\pm}\left(\mathbf{r},\, \mathbf{r}';\, E\right) = -\frac{e^{\pm i\sqrt{E}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi\left|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\right|} \;; \quad E \geq 0 \,. \tag{2.31}$$

Trong trường hợp riêng, khi $\eta = 0$, phương trình khảo sát (2.28) chuyển thành dạng Laplace (Jackson 1967):

$$\nabla^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \ . \tag{2.32}$$

Hàm Green tương ứng là (2.30) với $\eta = 0$:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0) = -\frac{1}{4\pi \, |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \ . \tag{2.33}$$

Sử dụng (2.33) và (2.25) ta có thể viết ngay lời giải tổng quát của phương trình Poisson (Jackson 1967):

$$\nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) = -4\pi \rho(\mathbf{r}) \tag{2.34}$$

dưới dạng .

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}) &= \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0)(-4\pi \rho(\mathbf{r}')) \, d\mathbf{r}' + \text{const} \\ &= \int \frac{\rho(\mathbf{r}') \, d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \text{const} \ . \end{aligned} \tag{2.35}$$

Đây chính là biểu thức định luật Coulomb cho thế tĩnh điện tại r gây bởi một vật mang điện với mật độ điện tích $\rho(\mathbf{r}')$.

2.2 Hàm Green của phương trình chứa đạo hàm bậc một theo thời gian

2.2.1 Định nghĩa

Trong tiết này ta khảo sát hàm Green $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')$ của phương trình chứa đạo hàm bậc một theo thời gian dạng

$$\left[\frac{i}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{L}(\mathbf{r})\right] g(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \, \delta(t - t') \ , \tag{2.36}$$

trong đó c là một hằng số dương, $\mathcal{L}(\mathbf{r})$ là toán tử vi phân tuyến tính Hermite, như đã giới thiệu ở trên. Liên quan với phương trình hàm Green (2.36) có phương trình đồng nhất

$$\left[\frac{i}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{L}(\mathbf{r})\right]\phi(\mathbf{r}, t) = 0 \tag{2.37}$$

và phương trình không đồng nhất

$$\left[\frac{i}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{L}(\mathbf{r})\right]\varphi(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, t) , \tag{2.38}$$

trong đó các hàm $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')$, $\phi(\mathbf{r}, t)$ và $\varphi(\mathbf{r}, t)$ thỏa mãn cùng một dạng điều kiện biên.

Trong việc xem xét hàm $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')$ phương pháp chung là: dùng biến đổi Fourier chuyển phương trình (2.36) sang dạng không phụ thuộc thời gian, là dạng đã được khảo sát chi tiết trong tiết 2.1. Thật vậy, với chú ý rằng, các biến thời gian t và t' chỉ xuất hiện đồng thời trong hiệu $(t - t')$, ta đưa vào biến $\tau = t - t'$ và thực hiện biến đổi Fourier hàm $g(t, t') \equiv g(\tau)$:

$$g(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega\tau}g(\omega) . \tag{2.39}$$

Thay (2.39) vào (2.36) ta nhận được phương trình đối với $g(\omega)$:

$$\left(\frac{\omega}{c} - \mathcal{L}\right)g(\omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') . \tag{2.40}$$

Trong hai phương trình trên để gọn ta không viết rõ các biến $\mathbf{r}$, $\mathbf{r}'$ của hàm g. Điều quan trọng là phương trình (2.40) sẽ trùng chính xác với phương trình (2.1) nếu trong (2.1) thay η bằng ω/c. Điều đó có nghĩa là hàm g trong (2.40) chính là $G(\eta)$ trong (2.1) với $\eta = \omega/c$:

$$g(\omega) = G(\omega/c) . \tag{2.41}$$

Hàm $G(\eta)$ đã được xác định ở tiết trên. Như vậy, hệ thức (2.41) cho phép xác định $g(\omega)$, rồi sử dụng (2.39) ta có thể nhận được $g(\tau)$ của phương trình (2.36).

2.2.2 Tính chất

Cũng như hàm $G(\eta)$, hàm $g(\omega)$ (2.41) giải tích khắp nơi trừ một số điểm gián đoạn hay cắt nhánh trên trục thực. Hệ quả của điều này là tích phân (2.39) không thể lấy trên trục thực. Thay vì, ta định nghĩa các hàm giới hạn

$$g^{(P)}(\tau) = \lim_{P \to P_0} \int_P \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\tau} G(\omega/c) \ , \tag{2.42}$$

trong đó P là đường tích phân nào đó, tiến tới giới hạn trục thực P_0 của mặt phẳng ω. Rõ ràng, có vô số cách chọn con đường P, nhưng về mặt vật lý chỉ có hai cách chọn có ý nghĩa như chỉ ra trên hình 2.1a và 2.1b. Hai hàm giới hạn tương ứng với hai cách chọn này là

$$g^{+}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G^{+}(\omega/c)\, e^{-i\omega\tau} \ ; \tag{2.43}$$

$$g^{-}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G^{-}(\omega/c)\, e^{-i\omega\tau} \ , \tag{2.43'}$$

trong đó $G^{\pm}(\omega/c)$ là các hàm giới hạn đã định nghĩa ở (2.9), (2.10). Theo định nghĩa này và theo hệ thức giữa G^+ và G^- (2.11), ta có:

$$g^{-}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = \left[g^{+}(\mathbf{r}', \mathbf{r}; -\tau)\right]^{*} \ . \tag{2.44}$$

Đồng thời, tương tự như $\tilde{G}$ (2.14), ta cũng định nghĩa hàm $\tilde{g}(\tau)$ với đường lấy tích phân như trên hình 2.1c:

$$\tilde{g}(\tau) = g^{+}(\tau) - g^{-}(\tau) \ . \tag{2.45}$$

$g^{+}(\tau)$ ⇔ ——→—— Re{ω} (a)

$g^{-}(\tau)$ ⇔ ——→—— Re{ω} (b)

$\tilde{g}(\tau)$ ⇔ ——⇄—— Re{ω} (c)

Hình 2.1: (a) - (b) - (c).

Để ý là, với $\tau > 0$ (hay < 0) ta có thể đóng kín đường tích phân đối với $g^{\pm}$

bằng nửa hình tròn vô hạn trong nửa mặt phẳng dưới (hoặc trên). Từ nhận xét này và định nghĩa (2.45), suy ra

$$g^{\pm}(\tau) = \pm\,\theta(\pm\tau)\,\tilde{g}(\tau) \ , \tag{2.46}$$

ở đây $\theta(\tau)$ là hàm bậc thang (Heaviside function):

$$\theta(\tau) = \begin{cases} 1 \ \text{nếu} \ \tau > 0 \\ 0 \ \text{nếu} \ \tau < 0 \ . \end{cases}$$

Phối hợp (2.43), (2.45) với định nghĩa $\tilde{G}$ (2.14) rồi (2.15), ta có thể biểu diễn $\tilde{g}(\tau)$ qua hàm riêng $\phi_n(\mathbf{r})$ và trị riêng E_n của toán tử $\mathcal{L}$:

$$\begin{aligned} \tilde{g}(\tau) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, e^{-i\omega\tau}\tilde{G}(\omega/c) \\ &= -2\pi i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, e^{-i\omega\tau} \sum_n \delta(\omega/c - E_n)\,\phi_n(\mathbf{r})\,\phi_n^*(\mathbf{r}') \\ &= -ic\sum_n e^{-icE_n\tau}\phi_n(\mathbf{r})\,\phi_n^*(\mathbf{r}') \ . \end{aligned} \tag{2.47}$$

Trong trường hợp với $\tau = 0$, hệ thức trên có dạng đơn giản:

$$\tilde{g}(0) = -ic\,\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

Để thấy thêm ý nghĩa của hàm Green $\tilde{g}$, ta viết lại (2.47) trong ký hiệu Dirac:

$$\tilde{g}(\tau) = -ic\,e^{-ic\mathcal{L}\tau}\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = -ic\exp(-ic\mathcal{L}\tau)\,. \tag{2.48}$$

Chú ý là, toán tử

$$U(t - t') = \exp\left[-ic\mathcal{L}(t - t')\right] \tag{2.49}$$

chính là toán tử tiến hóa, hay toán tử truyền (propagator) với ý nghĩa:

$$|\phi(t)\rangle = U(t - t')\ |\phi(t')\rangle \ , \tag{2.50}$$

trong đó $|\phi(t)\rangle$ là lời giải của phương trình đồng nhất (2.37). So sánh (2.48) và (2.49), suy ra hệ thức giữa hàm Green $\tilde{g}$ và hàm truyền U:

$$U(t-t') = \frac{i}{c}\,\tilde{g}(t-t') \,. \tag{2.51}$$

Như vậy, hàm $\tilde{g}$ có ý nghĩa của một hàm truyền. Và, vì toán tử U có tính chất

$$U(t_1-t_2) = U(t_1-t_3)\,U(t_3-t_2) \,,$$

nên hàm Green $\tilde{g}$ cũng có tính chất như vậy. Một hệ quả quan trọng của hai hệ thức (2.50) và (2.51) là lời giải $\phi(\mathbf{r}, t)$ của phương trình vi phân đồng nhất (2.37) có thể biểu diễn qua hàm Green $\tilde{g}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')$ của phương trình (2.36) dưới dạng:

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{i}{c}\int \tilde{g}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')\,\phi(\mathbf{r}', t')\,d\mathbf{r}' \,. \tag{2.52}$$

Tất nhiên, bằng hệ thức (2.46), trong biểu thức trên ta có thể dùng $g^{\pm}$ thay cho $\tilde{g}$.

Ngoài ra, ta cũng có thể biểu diễn lời giải của phương trình vi phân không đồng nhất (2.38) dưới dạng tổng của lời giải tổng quát của phương trình đồng nhất tương ứng $\phi(t)$ và một lời giải riêng xác định qua g^{+} hay $\tilde{g}$:

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t) + \int d\mathbf{r}'\,dt'\,g^{+}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t-t')\,f(\mathbf{r}', t') \,. \tag{2.53}$$

Lưu ý rằng, phản ứng của hệ ở thời điểm t phụ thuộc chỉ vào trạng thái của nguồn ở thời điểm trước đó, $t' < t$. Điều này xác định cận của tích phân theo t' trong (2.53) là từ $-\infty$ đến t.

2.2.3 Ví dụ

Tìm hàm Green của phương trình (2.36) cho trường hợp $\mathcal{L} = -\nabla^2$,

$$\left(\frac{i}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \nabla^2\right) g(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\delta(t-t') \,. \tag{2.54}$$

Giải. Ta chỉ cần tính $\tilde{g}$ là đủ vì các hàm khác có thể tính qua $\tilde{g}$. Vì hàm riêng của $\mathcal{L}$ là $\phi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}/\sqrt{\Omega}$ và trị riêng là $E = k^2$, theo (2.47) ta có:

$$\begin{aligned}\tilde{g}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) &= -ic\sum_k \frac{e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{\Omega} \cdot e^{-ick^2\tau} \\ &= -ic\int \frac{d^Dk}{(2\pi)^D} \cdot \exp\left(i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho} - ick^2\tau\right) ,\end{aligned}$$

trong đó D là số chiều, $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Để ý, $\mathbf{k}\boldsymbol{\rho} = \sum_1^D k_j\rho_j$; $k^2 = \sum_1^D k_i^2$, ta viết lại biểu thức trên

$$\begin{aligned}\tilde{g}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) &= -ic\prod_{j=1}^{D}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk_j}{2\pi}\, e^{ik_j\rho_j - ick_j^2\tau} \\ &= -ic\prod_{j=1}^{D}\exp\left(\frac{i\rho_j^2}{4c\tau}\right)\cdot\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{\pi}{ic\tau}} \\ &= -ic\left(\frac{1}{4\pi ic\tau}\right)^{D/2}\cdot\exp\left(\frac{i\rho^2}{4c\tau}\right) . \qquad (2.55)\end{aligned}$$

Đây là hàm Green cần tìm. Từ hàm này ta có thể tính $g^{\pm}$ theo (2.46). Theo (2.52) hàm $\tilde{g}$ (2.55) cho phép ta nghiên cứu tiến hóa, chẳng hạn, của một bó sóng cơ tự do.

2.3 Hàm Green của phương trình chứa đạo hàm bậc hai theo thời gian

2.3.1 Định nghĩa

Trong tiết này ta khảo sát hàm Green thỏa mãn phương trình chứa đạo hàm bậc hai theo thời gian dạng

$$\left(-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \mathcal{L}\right) g(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\,\delta(t - t') , \qquad (2.56)$$

trong đó c là một hằng số dương, $\mathcal{L}(\mathbf{r})$ là toán tử vi phân tuyến tính Hermite, như đã đề cập ở các tiết 2.1, 2.2. Liên quan với phương trình (2.56) có phương trình đồng nhất

$$\left(-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \mathcal{L}\right)\phi(\mathbf{r}, t) = 0 \tag{2.57}$$

và phương trình không đồng nhất

$$\left(-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \mathcal{L}\right)\varphi(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, t) \ . \tag{2.58}$$

Các hàm $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t')$, $\phi(\mathbf{r}, t)$ và $\varphi(\mathbf{r}, t)$ thỏa mãn cùng một dạng điều kiện biên.

Để tìm hàm Green g của phương trình (2.56), tương tự như ở tiết trên, phương pháp chung là, dùng biến đổi Fourier chuyển phương trình này sang dạng không phụ thuộc thời gian. Thật vậy, với $\tau = t - t'$, bằng biến đổi Fourier (2.39):

$$g(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega\tau}g(\omega) \ ,$$

ta chuyển phương trình (2.56) về dạng phương trình không phụ thuộc thời gian (2.1) với η thay bằng ω^2/c^2:

$$\left(\omega^2/c^2 - \mathcal{L}\right)g(\omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \ . \tag{2.59}$$

Thành thử, ta có thể viết ngay

$$g(\omega) = G\left(\omega^2/c^2\right) \ , \tag{2.60}$$

trong đó $G(\eta)$ là hàm Green của phương trình (2.1). Đặt (2.60) trở lại biến đổi Fourier (2.39) ta nhận được hàm Green $g(\tau)$ của (2.56).

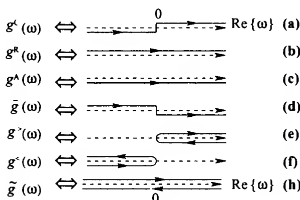
2.3.2 Tính chất

Ta biết hàm Green $G(\omega^2/c^2)$ giải tích khắp nơi, trừ những điểm mà ở đó ω^2/c^2 trùng với trị riêng E của $\mathcal{L}$. Vì E có thể dương hay âm, các điểm kỳ dị $\omega = c\sqrt{E}$ có thể nằm trên cả trục thực lẫn trục ảo của mặt phẳng phức ω. Ở đây, ta sẽ giới hạn chỉ xem xét trường hợp, khi các điểm kỳ dị của

$g(\omega) = G(\omega^2/c^2)$ nằm trên trục thực. Khi đó, vì tích phân (2.39) không xác định trên trục thực, tương tự với (2.42) ta phải xét các giới hạn:

$$g^{(P)}(\tau) = \lim_{P\to P_0} \int \frac{d\omega}{2\pi}\, g(\omega)\, e^{-\imath\omega\tau} = \lim_{P\to P_0} \int \frac{d\omega}{2\pi}\, G\left(\omega^2/c^2\right)\, e^{-\imath\omega\tau} .$$

Trong số các con đường P có thể, chỉ có 3 con đường như mô tả trên hình 2.2 a, b và c là đáng quan tâm về mặt vật lý. Tương ứng với ba con đường này có 3 hàm Green (2.61)_(2.63), theo thứ tự, ký hiệu là:



Hình 2.2: Các đường tích phân trong mặt phẳng ω:
(a) (h) cho tương ứng các hàm Green (2.61)-(2.67).

$$g^c(\omega) = \lim_{\delta\to 0_+} G\left(\frac{\omega^2}{c^2} + i\,\delta\right) = G^+\left(\omega^2/c^2\right) = \lim_{\delta\to 0_+} g\left(\omega + i\,\delta\, q(\omega)\right) , \tag{2.61}$$

$$g^R(\omega) = \lim_{\delta\to 0_+} G\left(\frac{\omega^2}{c^2} + i\,\delta q(\omega)\right) = \lim_{\delta\to 0_+} g(\omega + i\,\delta) , \tag{2.62}$$

$$g^A(\omega) = \lim_{\delta\to 0_+} G\left(\frac{\omega^2}{c^2} - i\,\delta q(\omega)\right) = \lim_{\delta\to 0_+} g(\omega - i\,\delta) , \tag{2.63}$$

trong đó $q(x) = \theta(x) - \theta(-x) = 1$ nếu $x > 0$ và -1 nếu $x < 0$. Ba hàm này là các hàm cơ sở. Hàm g^c thường gọi là hàm Green nhân quả, hay đơn giản là hàm Green với ký hiệu g. Hàm này được sử dụng rộng rãi nhất. Hàm g^R gọi là hàm Green trễ (retarded): $g^R(\tau) = 0$ khi $\tau < 0$. Hàm g^A gọi là hàm Green sớm (Advanced): $g^A(\tau) = 0$ khi $\tau > 0$.

Từ ba hàm cơ sở (2.61) (2.63) ta có thể định nghĩa các hàm khác, tương ứng với các đường tích phân từ (d) đến (h) trên hình 2.2:

$$\bar{g}(\omega) = G^-\left(\omega^2/c^2\right) = \lim_{\delta\to 0_+} g(\omega - i\,\delta\, q(\omega)) \,, \tag{2.64}$$

$$g^> = g - g^A \,. \tag{2.65}$$

$$g^< = g - g^R \,, \tag{2.66}$$

$$\tilde{g} = g^R - g^A \equiv g^> - g^< \,. \tag{2.67}$$

Chú ý là, các đường tích phân trên hình 2.2 có thể đóng kín theo nửa mặt phẳng dưới (hay trên) khi $\tau > 0$ (hay < 0). Từ đây, trực tiếp suy ra các hệ thức sau

$$g(\tau) = \theta(\tau)\, g^>(\tau) + \theta(-\tau)\, g^<(\tau) \,, \tag{2.68}$$

$$g^R(\tau) = \theta(\tau)\, \tilde{g}(\tau) \,, \tag{2.69}$$

$$g^A(\tau) = -\theta(-\tau)\, \tilde{g}(\tau) \,, \tag{2.70}$$

$$\bar{g}(\tau) = -\theta(\tau)\, g^<(\tau) - \theta(-\tau)\, g^>(\tau) \,. \tag{2.71}$$

Từ (2.67) - (2.71) rõ ràng là, nếu biết $g^>$ và $g^<$ ta có thể xác định tất cả các hàm khác.

Hơn nữa, các hàm Green g, $\tilde{g}$ ở trên đều có thể biểu diễn qua các hàm Green không phụ thuộc thời gian $G, G^{\pm}$ và $\tilde{G}$, để rồi có thể biểu diễn tiếp qua các hàm riêng, trị riêng của toán tử $\mathcal{L}$. Chẳng hạn,

$$\begin{aligned}
g^>(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) &= \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi}\, e^{-i\omega\tau} G^+\left(\omega^2/c^2\right) + \int_\infty^0 \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\tau} G^-\left(\omega^2/c^2\right) \\
&= \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi}\, e^{-i\omega\tau} \left[G^+\left(\omega^2/c^2\right) - G^-\left(\omega^2/c^2\right)\right] \\
&= \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi}\, e^{-i\omega\tau}\, \tilde{G}\left(\omega^2/c^2\right) \\
&= \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi}\, e^{-i\omega\tau}\, 2\pi\, i \sum \delta\left(\omega^2/c^2 - E_n\right) \phi_n(\mathbf{r})\, \phi_n^*(\mathbf{r}') \,.
\end{aligned}$$

Ở đây, ta đã sử dụng hệ thức (2.15) cho $\tilde{G}$. Tích phân trên có thể tính bằng cách viết $\int d\omega = c^2 \int (1/2\,\omega)\, d\left(\omega^2/c^2\right)$, rồi sử dụng tính chất của hàm delta.

Kết quả cho,

$$g^{>}(\mathbf{r},\, \mathbf{r}';\, \tau) = -\frac{i\,c}{2}\sum_n \frac{\phi_n(\mathbf{r})\ \phi_n^*(\mathbf{r}')}{\sqrt{E_n}}\,.\exp\left(-\,i\,c\,\sqrt{E_n}\,\tau\right)\ , \qquad (2.72)$$

trong đó $\sqrt{E_n} > 0$.
Bằng cách tương tự, ta có:

$$g^{<}(\mathbf{r},\, \mathbf{r}';\, \tau) = -\frac{i\,c}{2}\sum_n \frac{\phi_n(\mathbf{r})\ \phi_n^*(\mathbf{r}')}{\sqrt{E_n}}\,.\exp\left(i\,c\,\sqrt{E_n}\,\tau\right)\ . \qquad (2.73)$$

So sánh (2.72) với (2.73) cho ta hệ thức

$$g^{<}(\mathbf{r},\, \mathbf{r}';\, \tau) = -\left[g^{>}(\mathbf{r}',\, \mathbf{r}\,;\, \tau)\right]^*\ . \qquad (2.74)$$

Từ $g^{>}$ và $g^{<}$ nhận được, ta có thể viết các biểu thức tương tự cho các hàm Green khác. Chẳng hạn, theo (2.67), (2.72) và (2.73),

$$\tilde{g}(\mathbf{r},\, \mathbf{r}';\, \tau) = -c\sum_n \frac{\phi_n(\mathbf{r})\ \phi_n^*(\mathbf{r}')}{\sqrt{E_n}}\ \sin\left(c\,\sqrt{E_n}\,\tau\right)\ . \qquad (2.75)$$

Lưu ý là, các hệ thức trên sẽ gọn hơn, nếu ta viết chúng dưới dạng toán tử. Chẳng hạn, với (2.75):

$$\tilde{g}(\tau) = -\,c\,\frac{\sin\left(c\sqrt{\mathcal{L}}\tau\right)}{\sqrt{\mathcal{L}}}\ ; \qquad \tau = t - t' \qquad (2.76)$$

($\mathcal{L}$ là toán tử trong (2.56) với hàm riêng $\phi_n(r)$, trị riêng E_n).

Cuối cùng, dễ dàng kiểm tra các biểu thức sau đây đối với lời giải của phương trình đồng nhất (2.57):

$$\begin{aligned}\phi(\mathbf{r},\, t) = &\ -\frac{1}{c^2}\int d\mathbf{r}'\tilde{g}(\mathbf{r},\, \mathbf{r}';\, t-t')\,\dot{\phi}(\mathbf{r}',\, t')\\ &-\frac{1}{c^2}\int d\mathbf{r}'\dot{\tilde{g}}(\mathbf{r},\, \mathbf{r}';\, t-t')\,\phi(\mathbf{r}',\, t')\ ,\end{aligned} \qquad (2.77)$$

và lời giải của phương trình không đồng nhất (2.58):

$$\begin{aligned}\varphi(\mathbf{r},\, t) &= \phi(\mathbf{r},\, t) + \int d\mathbf{r}'\,dt'g^R(\mathbf{r},\, \mathbf{r}';\, t-t')\ f(\mathbf{r}',\, t')\\ &= \phi(\mathbf{r}, t) + \int d\mathbf{r}'\int_{-\infty}^{t} dt'\tilde{g}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t-t')\,f(\mathbf{r}', t')\ .\end{aligned} \qquad (2.78)$$

Trong (2.77), dấu chấm trên các ký hiệu ngụ ý đạo hàm theo t, còn $\dot{\phi}(t')$ là $d\phi/dt$ với $t = t'$. Trong (2.78), hàm $\phi(\mathbf{r}, t)$ chính là lời giải tổng quát của phương trình đồng nhất tương ứng, hàm g^R ngụ ý rằng, phản ứng $\varphi(\mathbf{r}, t)$ tại t phụ thuộc vào trạng thái của nguồn $f(\mathbf{r}, t')$ ở $t' < t$.

2.3.3 Ví dụ

Tìm hàm Green của phương trình (2.56) với $\mathcal{L} = -\nabla^2$.

Giải. Ta chỉ cần tìm $g^>$ và $g^<$ là đủ. Theo biểu thức (2.72), ta có

$$g^>(\tau) = \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\tau} \left(G^+\left(\omega^2/c^2\right) - G^-\left(\omega^2/c^2\right)\right) .$$

Biết

$$G^\pm(E) = \left(-\frac{1}{4\pi\rho}\right) . \exp\left(\pm i\sqrt{E}\rho\right)$$

(xem (2.31) với $\rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$; $\sqrt{E}$, $E > 0$), ta viết được:

$$g^>(\rho, \tau) = -\frac{1}{4\pi\rho}\int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\tau} \left(e^{i\omega\rho/c} - e^{-i\omega\rho/c}\right) . \tag{2.79}$$

Sử dụng kết quả này và hệ thức (2.74), ta có tiếp:

$$g^<(\rho, \tau) = -\frac{1}{4\pi\rho}\int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega\tau} \left(e^{i\omega\rho/c} - e^{-i\omega\rho/c}\right) . \tag{2.80}$$

Ta sẽ tính cụ thể, chẳng hạn, hàm $\tilde{g}$. Thay (2.79) và (2.80) vào (2.67), được:

$$\begin{aligned}
\tilde{g}(\rho, \tau) &= \frac{1}{4\pi\rho}\int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \left(e^{i\omega\rho/c} - e^{-i\omega\rho/c}\right)\left(e^{i\omega\tau} - e^{-i\omega\tau}\right) \\
&= \frac{1}{4\pi\rho}\left\{\int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \left(e^{i\omega(\rho/c+\tau)} - e^{-i\omega(\rho/c-\tau)}\right) + \right. \\
&\quad \left. + \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \left(e^{-i\omega(\rho/c+\tau)} - e^{i\omega(\rho/c-\tau)}\right)\right\} \\
&= \frac{1}{4\pi\rho}\int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \left(e^{i\omega(\rho/c+\tau)} - e^{i\omega(\rho/c-\tau)}\right) \\
&= \frac{1}{4\pi\rho}\left[\delta(\rho/c + \tau) - \delta(\rho/c - \tau)\right] \\
&= \frac{c}{4\pi\rho}\left[\delta(\rho + c\tau) - \delta(\rho - c\tau)\right] .
\end{aligned} \tag{2.81}$$

Ở đây, ta vẫn dùng các ký hiệu quen thuộc : $\rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ và $\tau = t - t'$.

Từ các kết quả trên, theo (2.69) và (2.70), ta có thể viết tiếp ngay các hàm g^R và g^A :

$$g^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t') = -\frac{c}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\,\delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| - c(t - t')) \, , \quad (2.82)$$

$$g^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t') = -\frac{c}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\,\delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| + c(t - t')) \, , \quad (2.83)$$

Các kết quả nhận được có ý nghĩa vật lý rất rõ ràng. Hàm g^R mô tả sự chậm của tương tác: trạng thái của nguồn điểm tại $(\mathbf{r}', t')$ chỉ quan sát được ở $\mathbf{r}$ sau một khoảng thời gian $(t - t') = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c$. Hàm g^A ngược lại, mô tả hiệu ứng sớm. Thay (2.82) vào (2.78) ta có lời giải của phương trình không đồng nhất $[(-1/c^2)\,\partial^2/\partial t^2 + \nabla^2]\,\varphi(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, t)$ là:

$$\begin{aligned}\varphi(\mathbf{r}, t) &= \phi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{4\pi}\int d\mathbf{r}'dt'\,\frac{\delta[|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c - (t - t')]}{\rho}\,f(\mathbf{r}', t') \\ &= \phi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{4\pi}\int d\mathbf{r}'\,\frac{f(\mathbf{r}', t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \, . \quad (2.84)\end{aligned}$$

Số hạng thứ hai trong vế phải của kết quả trên chính là biểu thức của thế chậm quen thuộc trong điện động lực học (xem, Jackson (1967)).

2.4 Bài toán ứng dụng đơn giản: một hạt tự do

Nội dung của tiết này là tổng quan vắn tắt những tính chất quan trọng nhất của hàm Green trong áp dụng vào các bài toán vật lý chất rắn, rồi minh họa bằng bài toán một hạt tự do.

2.4.1 Hình thức luận chung

Với các hệ vật lý, toán tử $\mathcal{L}$ trong (2.1) thường là Hamiltonian $\mathcal{H}$ của hệ. Phương trình hàm Green (2.1) khi đó là:

$$[\eta - \mathcal{H}(\mathbf{r})]\,G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \, . \quad (2.85)$$

Phương trình đồng nhất tương ứng chính là phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian:

$$(E - \mathcal{H})\,\psi(\mathbf{r}) = 0\ . \tag{2.86}$$

Các hàm G và ψ thỏa mãn cùng một dạng điều kiện biên. Lời giải $\psi_n(\mathbf{r})$ và E_n của (2.86) chính là hàm riêng ($\phi_n(\mathbf{r})$) và trị riêng của $\mathcal{L}$ trong (2.1). Và như vậy, theo (2.5) - (2.7), ta có

$$G(\mathbf{r},\, \mathbf{r}'\,;\, \eta) = \sum_n \frac{\psi_n(\mathbf{r})\,\psi_n^*(\mathbf{r}')}{\eta - E_n}\ , \tag{2.87}$$

hay trong kí hiệu Dirac

$$G(\eta) = \sum_n \frac{|\psi_n\rangle\,\langle\psi_n|}{\eta - E_n} = \frac{1}{\eta - \mathcal{H}}\ . \tag{2.88}$$

Theo phân tích chung trong tiết 2.1, từ hàm Green (2.88) ta có thể khai thác các thông tin sau:

(1) Vị trí các cực của $G(\eta)$ cho các trị riêng gián đoạn của Hamiltonian $\mathcal{H}$.

(2) Thặng dư của $G(\mathbf{r},\, \mathbf{r}'\,;\, \eta)$ tại cực $\eta = E_n$ bằng $\sum_{(j)} \psi_n^{(j)}(\mathbf{r})\ \psi_n^{(j)}(\mathbf{r}')^*$, trong đó tổng lấy theo bậc suy biến f_n của hàm riêng ứng với trị riêng E_n. Như vậy, bậc suy biến của trạng thái $\psi_n(\mathbf{r})$ có thể xác định bằng:

$$\int d\mathbf{r}\, \mathrm{Res}\left\{G(\mathbf{r},\, \mathbf{r}\,;\, E_n)\right\} = \int d\mathbf{r} \sum_j \psi_n^{(j)}(\mathbf{r})\ \psi_n^{(j)}(\mathbf{r})^* = f_n$$

hay

$$f_n = \mathrm{Tr}\left(\mathrm{Res}\left\{G(E_n)\right\}\right)\ . \tag{2.89}$$

Trong trường hợp của trạng thái không suy biến, $f_n = 1$, thì ta đơn giản có

$$\psi_n(\mathbf{r})\,\psi_n^*(\mathbf{r}') = \mathrm{Res}\left\{G(\mathbf{r},\, \mathbf{r}'\,;\, E_n)\right\}\ , \tag{2.90}$$

và, đặc biệt, với yếu tố chéo thì

$$|\psi_n(\mathbf{r})|^2 = \mathrm{Res}\left\{G(\mathbf{r},\, \mathbf{r}\,;\, E_n)\right\}\ . \tag{2.91}$$

Nếu quy ước pha của $\psi_n(\mathbf{r}')$ tại $\mathbf{r}' = 0$ là bằng không, thì từ (2.90) và (2.91) suy ra pha của hàm này tại r là:

$$\varphi_n(\mathbf{r}) = -i \ln \left\{ \frac{\operatorname{Res}\{G(\mathbf{r}, 0; E_n)\}}{[\operatorname{Res}\{G(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E_n)\} . \operatorname{Res}\{G(0, 0; E_n)\}]^{1/2}} \right\} . \tag{2.92}$$

Như vậy, thặng dư của hàm Green tại cực điểm cho ta biết không chỉ biên độ (2.91) mà cả pha (2.92) của hàm sóng.

(3) Cắt nhánh của $G(\eta)$ trên trục thực trùng với phổ liên tục của $\mathcal{H}$.

(4) Mật độ trạng thái trong một đơn vị thể tích có thể tính qua các hàm giới hạn $G^{\pm}$ trong miền phổ liên tục:

$$\rho(\mathbf{r}, E) = \mp\frac{1}{\pi} \operatorname{Im}\{G^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E)\} = -\frac{1}{2\pi i} \tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E), \tag{2.93}$$

còn mật độ trạng thái trong toàn hệ bằng

$$N(E) = \int d\mathbf{r}\, \rho(\mathbf{r}, E) = \mp\frac{1}{\pi} \operatorname{Im}\{\operatorname{Tr} G^{\pm}(E)\} . \tag{2.94}$$

(5) Sử dụng các kết quả trong tiết 2.2 ta có thể viết lời giải của phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H}\right) |\psi(t)\rangle = 0 \tag{2.95}$$

dưới dạng

$$|\psi(t)\rangle = U(t-t')\, |\psi(t')\rangle , \tag{2.96}$$

trong đó toán tử tiến hóa thời gian

$$U(t-t') = \exp\left[\frac{-i\mathcal{H}(t-t')}{\hbar}\right] . \tag{2.97}$$

Ở đây, chú ý, $\hbar$ trong (2.95), (2.97) đóng vai trò c^{-1} trong (2.37). Sử dụng (2.51), ta viết tiếp

$$U(t-t') = i\hbar\, \tilde{g}(t-t') = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, e^{-i\omega(t-t')}\, \tilde{G}(\hbar\omega) . \tag{2.98}$$

Tính đến hệ thức này giữa $U(t-t')$ và $\tilde{g}(t-t')$, ta có thể viết lại (2.96) trong r-biểu diễn

$$\psi(\mathbf{r},t) = i\hbar \int \tilde{g}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t-t')\,\psi(\mathbf{r}',t')\,d\mathbf{r}' . \qquad (2.99)$$

2.4.2 Bài toán một hạt tự do

Ta áp dụng các kết quả trên cho bài toán một hạt tự do với khối lượng m. Hamiltonian có dạng $\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_0 = -(\hbar/2m)\nabla^2$ và phương trình hàm Green (2.85) là

$$\left(\eta + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right) G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}';\eta) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') . \qquad (2.100)$$

Ở đây và sau này ta sẽ dùng chỉ số " o " $(G_0, \mathcal{H}_0)$ cho các đại lượng mô tả một hạt tự do.

Viết lại phương trình trên dưới dạng

$$\left(\frac{2m}{\hbar^2}\eta + \nabla^2\right)\left(\frac{\hbar^2}{2m}G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}';\eta)\right) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') .$$

So sánh phương trình này với phương trình hàm Green của toán tử $\mathcal{L} = -\nabla^2$, ta thấy ngay giữa G_0 và G của (2.28) có đồng nhất thức

$$G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}';\eta) = \frac{2m}{\hbar^2}\,G\left(\mathbf{r},\mathbf{r}';\frac{2m}{\hbar^2}\eta\right) . \qquad (2.101)$$

Dạng của G phụ thuộc vào số chiều. Xét các trường hợp cụ thể.

Trường hợp 3 chiều. Từ các kết quả (2.30) và (2.31) đối với các hàm G và $G^{\pm}$ của toán tử $\mathcal{L} = -\nabla^2$, sử dụng (2.101) ta viết được ngay

$$G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}';E) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{-k_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} ; \quad E \le 0 , \qquad (2.102)$$

$$G_0^{\pm}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{\pm ik_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} ; \quad E \ge 0 , \qquad (2.103)$$

trong đó $k_0 = \sqrt{2m\,|E|}/\hbar \geq 0$.

Hàm $G_0(\eta)$ có cắt nhánh trên nửa trục thực $\eta = E > 0$, tương ứng với phổ liên tục của $\mathcal{H}_0$. Dọc theo cắt nhánh ta có

$$\begin{aligned} \tilde{G}(\mathbf{r}.\ \mathbf{r}'\,;\ E) &= G^+(\mathbf{r}.\ \mathbf{r}'\,;\ E) - G^-(\mathbf{r}.\ \mathbf{r}'\,;\ E) \\ &= -2\pi i\,\frac{m}{2\pi^2\hbar^2}\cdot\frac{\sin(k_0\,|\,\mathbf{r}-\mathbf{r}'\,|)}{|\,\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\;\theta(E)\ . \qquad (2.104) \end{aligned}$$

Từ đây, theo (2.93), có ngay mật độ trạng thái một hạt tự do trong một đơn vị thể tích trong hệ 3 chiều là

$$\begin{aligned} \rho_0(\mathbf{r},\ E) &= -\frac{1}{2\pi i}\,\tilde{G}(\mathbf{r},\ \mathbf{r}\,;\ E) = \frac{m\,k_0}{2\pi^2\hbar^2}\cdot\theta(E) \\ &= \theta(E)\,\frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\,\pi^2\,\hbar^3}\,\sqrt{E}\ . \qquad (2.105) \end{aligned}$$

Nếu tính đến spin (nhân thêm với 2) thì kết quả này trùng chính xác với biểu thức (1.7).

Trường hợp 2 chiều. Sử dụng kết quả của bài tập B2.2 (cuối chương này) và hệ thức (2.101) ta có ngay các hàm Green của phương trình (2.100) trong trường hợp 2 chiều là:

$$G_0(\mathbf{r},\ \mathbf{r}'\,;\ E) = -\frac{m}{\pi\,\hbar^2}\,K_0(k_0\,|\,\mathbf{r}-\mathbf{r}'\,|)\ ;\ E < 0. \qquad (2.106)$$

$$G_0^{\pm}(\mathbf{r},\ \mathbf{r}'\,;\ E) = -\frac{i\,m}{2\,\hbar^2}\,H_0^{(1)}(\pm k_0\,|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)\ ;\ E > 0, \qquad (2.107)$$

trong đó $k_0 = \sqrt{2m\,|E|}/\hbar \geq 0$, K_0 là hàm Bessel biến điệu bậc không, còn $H_0^{(1)}$ là hàm Hankel loại một, bậc không. Sử dụng (2.107) và các hệ thức (xem, chẳng hạn, Abramowitz and Stegun (1965)):

$$\begin{aligned} H_0^{(1)}(-x) &= -H_0^{(2)}(x) \\ H_0^{(1)} &= J_0 + i\,Y_0 \quad ; \quad H_0^{(2)} = J_0 - i\,Y_0\ , \end{aligned}$$

ta có thể tính tiếp hàm $\tilde{G}_0(\mathbf{r},\ \mathbf{r}'\,;\ E)$:

$$\begin{aligned} \tilde{G}_0(\mathbf{r},\mathbf{r}';E) &= -\frac{i\,m}{2\hbar^2}\theta(E)\left(H_0^{(1)}(k_0\,|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) - H_0^{(1)}(-k_0\,|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)\right) \\ &= -2\,\pi\,i\,\theta(E)\,\frac{m}{2\pi\,\hbar^2}\,J_0(k_0\,|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)\ . \qquad (2.108) \end{aligned}$$

Trong các biểu thức trên, J_0 là hàm Bessel loại một, bậc không, còn Y_0 là hàm Bessel loại hai, bậc không.

Mật độ trạng thái trên một đơn vị diện tích được tính theo (2.93), sử dụng $\tilde{G}_0$ (2.108):

$$\rho_0\,(\mathbf{r};\,E) = \theta\,(E)\;\frac{m}{2\pi\hbar^2}\;. \tag{2.109}$$

Nếu tính đến spin (nhân thêm với 2), thì kết quả này trùng chính xác với biểu thức (1.69).

Trường hợp 1 chiều. Sử dụng kết quả của bài tập B2.2, làm tương tự như trường hợp 2 chiều ta có các hàm Green cho hạt tự do 1 chiều:

$$G_0\,(x,\,x';E) \;=\; -\frac{m}{\hbar^2\,k_0}\,\exp\left(-k_0\,|\,x-x'\,|\right);\;\; E<0 \tag{2.110}$$

$$G_0^{\pm}\,(x,\,x';E) \;=\; \mp\frac{i\,m}{\hbar^2 k_0}\,\exp\left(\pm\,i\,k_0\,|x-x'|\right);\;\; E>0, \tag{2.111}$$

$$\tilde{G}_0\,(x,\,x';E) \;=\; -2\,\pi\,i\,\theta\,(E)\,\frac{m}{\pi\,\hbar^2 k_0}\,\cos\left(k_0\,|x-x'|\right),\;\;, \tag{2.112}$$

và mật độ trạng thái trên một đơn vị chiều dài:

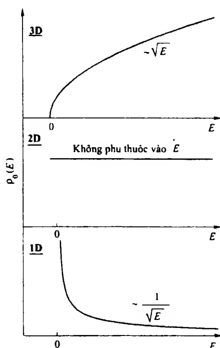
$$\rho_0\,(x,\,E) \;=\; \theta\,(E)\,\frac{m}{\pi\,\hbar^2\,k_0} \;=\; \theta\,(E)\,\cdot\frac{m^{1/2}}{\sqrt{2}\pi\,\hbar}\cdot\frac{1}{\sqrt{E}}\;. \tag{2.113}$$

Nếu tính đến spin, thì kết quả này cũng trùng chính xác với (1.69).

Các mật độ trạng thái nhận được cho cả ba trường hợp: 3 chiều (2.105), 2 chiều (2.109) và 1 chiều (2.113) được mô tả bằng đồ thị trên hình 2.3. Đây là những kết quả quen thuộc, quan trọng trong vật lý chất rắn và sẽ được sử dụng trong các chương sau. Ở đây có một số điểm cần bàn luận.

Trong cả ba trường hợp phổ liên tục đều có ngưỡng dưới ở $E = 0$: $\rho_0\,(E) = 0$ với $E \leq 0$. Tuy nhiên, dáng điệu của $\rho_0\,(E)$ (hay $\tilde{G}\,(E)$) ở gần ngưỡng vùng thì rất khác nhau. Vì nhiều tính chất vật lý của hệ liên quan với chính dáng điệu của mật độ trạng thái ở gần ngưỡng vùng, nên sự khác nhau này sẽ dẫn đến những hệ quả quan trọng, đặc thù cho số chiều của hệ.

Nói chung, dáng điệu của $\rho\,(E)$ (hay $\tilde{G}\,(E)$) ở lân cận một năng lượng E_0 nào đó quy định tính chất giải tích của hàm Green ở lân cận năng lượng đó: nếu $\rho\,(E)$ (hay $\tilde{G}\,(E)$) là hàm liên tục quanh E_0, thì $G^{\pm}\,(E)$ cũng là



Hình 2.3: Mật độ trạng thái $\rho_0(E)$ cho các hệ 3 chiều (3D), 2 chiều (2D), 1 chiều (1D)

hàm liên tục trong miền đó ; nếu $\rho(E)$ (hay $\tilde{G}(E)$) có gián đoạn tại E_0 thì $G^{\pm}(E)$ có kỳ dị logarit tại đó ; cuối cùng, nếu $\rho(E)$ (hay $\tilde{G}(E)$) có dạng $\propto (E - E_0)^{-\gamma}$ với $0 < \gamma < 1$, thì $G^{\pm}(E)$ cũng dần ra vô hạn như $(E - E_0)^{-\gamma}$ khi E dần tới E_0.

Với hệ 3 chiều, $\rho_0(E)$ dần liên tục đến không theo $\propto \sqrt{E - E_0}$ khi $E \rightarrow E_0 = 0_+$. Hệ quả là các hàm $G^{\pm}(E)$ cũng liên tục tại ngưỡng dưới $E_0 = 0$. Với hệ 2 chiều, hàm $\rho_0(E)$ có gián đoạn tại $E_0 = 0$. Hệ quả là, các Green có kỳ dị logarit. Thật vậy, khi $E \rightarrow 0_+$, tức là $k_0 \rightarrow 0_+$ các hàm (2.106) và (2.107) chuyển về giới hạn:

$$G_0(E) = -\frac{m}{\pi\hbar^2}K_0(k_0|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \xrightarrow[k_0 \rightarrow 0_+]{} \frac{m}{\pi\hbar^2}\ln(k_0|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)\,. \tag{2.114}$$

$$G_0^{\pm}(E) = -\frac{im}{2\hbar^2}H_0^{(1)}(\pm k_0|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \xrightarrow[k_0 \rightarrow 0_+]{} \frac{m}{\pi\hbar^2}\ln(k_0|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)\,. \tag{2.115}$$

Với hệ 1 chiều, $\rho_0(E)$ (hay $\tilde{G}(E)$) dần ra vô hạn như $\propto 1/\sqrt{E}$ khi

$E \to 0_+$. Hệ quả là các hàm Green (2.110) và (2.11) đều dần ra vô hạn khi $k_0 \to 0_+$.

Thảo luận bổ sung và bài tập

B2.1 George Green sinh năm 1793 tại Nottingham (England). Có rất ít tư liệu về thời niên thiếu của Ông. Năm 1828 Green công bố bài báo đầu tiên "An Essay on the Application of Mathematical Analysis to the Theories of Electricity and Magnetism". Đây là một công trình vĩ đại, nhưng đăng ở một nhà xuất bản tư nhân tỉnh lẻ, nên một thời gian dài không được ai biết đến. Năm 1829 George Green đến Cambridge học, rồi ở lại làm việc tại Gonville & Caius College. Vì lý do sức khoẻ, Ông trở về quê và mất tại đó năm 1841. Ông để lại tất cả mười bài báo, trong đó vĩ đại nhất là "Essay" năm 1828. Mãi đến năm 1845 (bốn năm sau khi George Green mất!) "Essay" vĩ đại của Green mới được William Thomson phát hiện và cho in lại trên Grelle's Journal. Về bản chất, trong bài báo này George Green đã khai sinh phương pháp hàm Green với ứng dụng vào bài toán điện và từ (tên gọi "Green's function" là do Riemann đề xuất).

B2.2 Tìm hàm Green của phương trình (2.28) cho 2 trường hợp: (a) Hệ 2 chiều; (b) Hệ 1 chiều.
Trả lời :

(a)

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta) = -\frac{i}{4} H_0^{(1)} (\sqrt{\eta}\,|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \;; \mathrm{Im}\{\sqrt{\eta}\} > 0 ,$$

$$G^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{i}{4} H_0^{(1)} \left(\pm\sqrt{E}\,|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\right) \;; E > 0 , \sqrt{E} > 0.$$

(b)

$$G(x, x'; \eta) = \frac{e^{i\sqrt{\eta}\,|x - x'|}}{2i\sqrt{\eta}} \;; \mathrm{Im}\{\sqrt{\eta}\} > 0 ,$$

$$G^{\pm}(x, x'; E) = \mp\frac{i}{2\sqrt{E}} \left(\pm i\sqrt{E}\,|x - x'|\right) \;; E > 0 , \sqrt{E} > 0 .$$

B2.3 Tìm hàm Green của phương trình khuyếch tán

$$\left(-\alpha^2 \frac{\partial}{\partial t} + \nabla^2\right) g_d(\mathbf{r}, \mathbf{r}' ; t - t') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\, \delta(t - t') \ .$$

Trả lời :
So sánh phương trình này với (2.54) ta thấy chỉ khác ở chỗ thay (i/c) bằng $(-\alpha^2)$. Từ đây suy ra, các hàm Green của phương trình khuyếch tán có thể nhận trực tiếp từ các kết quả tương ứng trong ví dụ ở tiết 2.2 bằng thay $(i/c) \rightarrow (-\alpha^2)$. Chẳng hạn, từ (2.55) ta có tương ứng hàm Green $\tilde{g}_d$ của phương trình khuyếch tán:

$$\tilde{g}_d(\mathbf{r}, \mathbf{r}' ; \tau) = -\frac{1}{\alpha^2}\theta(\tau)\left(\frac{\alpha^2}{4\pi\tau}\right)^{D/2} . \exp\left(-\frac{\alpha^2 \rho^2}{4\tau}\right) .$$

Ở đây, $\tau = t - t'$; $\rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$; D là số chiều của hệ khảo sát.

B2.4 Hãy kiểm tra lại các kết luận (2.76) và (2.77) (xem, chẳng hạn, Morse and Feshback (1953)).

B2.5 Hãy tìm các hàm Green của phương trình sóng (2.56) với $\mathcal{L} = -\nabla^2$ cho hai trường-hợp: (a) Hệ 2 chiều, (b) Hệ 1 chiều (tương tự như trường hợp 3 chiều trong ví dụ ở tiết 2.3).
Trả lời :
(a)

$$\begin{aligned} \tilde{g}(\mathbf{r}, \mathbf{r}' ; \tau) &= -q(\tau)\,\theta(c|\tau| - \rho)\,\frac{c}{2\pi\sqrt{c^2\tau^2 - \rho^2}} , \\ g^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}' ; \tau) &= -\theta(c\tau - \rho)\,\frac{c}{2\pi\sqrt{c^2\tau^2 - \rho^2}} . \end{aligned}$$

(b)

$$g^R(x, x' ; \tau) = -\frac{1}{2}c\,\theta(c\tau - |x - x'|) .$$

(xem Morse and Feshback (1953)).

Chương 3

Các hàm Green trong Vật lý chất rắn

Hình thức luận Hàm Green trình bày trong chương 2 rất đơn giản và tiện lợi trong áp dụng vào các bài toán một hạt riêng lẻ trong trường ngoài. Nội dung của chương 3 chủ yếu là phát biểu lại định nghĩa hàm Green ở dạng tổng quát hơn, biểu diễn qua các toán tử trường trong hình thức luận lượng tử hóa lần thứ hai. Những định nghĩa này đúng cho hệ tương tác bất kỳ và sẽ cần dùng đến trong các chương sau.

Dù rằng phương pháp lượng tử hóa lần thứ hai được trình bày chi tiết ở hầu khắp các sách giáo khoa về cơ học lượng tử, để tiện theo dõi, chúng tôi tóm tắt nội dung chính của phương pháp này ở Phụ lục C, trong đó cũng thảo luận việc biểu diễn lại các hàm Green đã xét trong chương 2 qua các toán tử trường.

Vì đối tượng của cuốn sách này là Vật lý chất rắn, chúng tôi sẽ trước hết tập trung xem xét hàm Green electron, và sau đó, hàm Green phonon. Đây cũng là hai dạng hàm Green điển hình, đặc trưng cho hai loại hạt: fermion (electron) và boson (phonon). Các hàm Green khác có thể định nghĩa tương tự như một trong hai loại hàm Green này.

3.1 Biểu diễn tương tác và S-matrận

Có ba biểu diễn mô tả sự thay đổi trạng thái của hệ theo thời gian, đó là: biểu diễn Schrödinger, biểu diễn Heisenberg và biểu diễn tương tác.

3.1.1 Biểu diễn Schrodinger

Đây là biểu diễn kinh điển nhất của cơ học lượng tử, dựa vào chính phương trình Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} = \mathcal{H}\psi(t) \;.$$

Lời giải dưới dạng toán tử của phương trình này là

$$\psi(t) = e^{-i\mathcal{H}t}\psi(0) \,. \tag{3.1}$$

Trong biểu diễn Schrödinger hàm sóng phụ thuộc vào thời gian dưới dạng (3.1), còn toán tử, trong đó có $\mathcal{H}$, không phụ thuộc thời gian.

3.1.2 Biểu diễn Heisenberg

Trong biểu diễn này hàm sóng không phụ thuộc thời gian, còn toán tử phụ thuộc thời gian dưới dạng:

$$Q(t) = e^{i\mathcal{H}t}Q(0)\, e^{-i\mathcal{H}t}. \tag{3.2}$$

Hệ thức này tương đương với phương trình toán tử:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}Q(t) &= Q(t)\,\mathcal{H} - \mathcal{H}\,Q(t) \\ &\equiv [Q(t)\,,\,\mathcal{H}] \end{aligned} \tag{3.3}$$

(thường gọi là phương trình Heisenberg).

3.1.3 Biểu diễn tương tác

Trong biểu diễn này, hàm sóng và toán tử đều phụ thuộc thời gian. Để dẫn ra các hệ thức phụ thuộc đó, ta viết Hamiltonian toàn phần dưới dạng

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V \,, \tag{3.4}$$

trong đó $\mathcal{H}_0$ là phần không tương tác và được chọn đủ đơn giản để có thể giải chính xác; V là phần tương tác, có thể gồm một hay nhiều thế tương tác khác nhau. Ký hiệu $\hat{\psi}(t)$ hay $\hat{Q}(t)$ với dấu mũ là hàm sóng hay toán tử trong biểu diễn tương tác, thì các đại lượng này phụ thuộc vào thời gian dưới dạng

$$\hat{\psi}(t) = e^{i\mathcal{H}_0 t} e^{-i\mathcal{H} t} \psi(0), \tag{3.5}$$

$$\hat{Q}(t) = e^{i\mathcal{H}_0 t} Q e^{-i\mathcal{H}_0 t}. \tag{3.6}$$

Ta thấy, trong biểu diễn tương tác, sự phụ thuộc thời gian của các toán tử quy định chỉ bởi phần Hamiltonian không tương tác $\mathcal{H}_0$. Đối với hàm sóng (3.5) ta lưu ý, vì nói chung $\mathcal{H}_0$ không giao hoán với V, các số mũ trong (3.5) không thể cộng gộp lại. Dù vậy, ta có thể chỉ ra rằng, sự phụ thuộc thời gian của $\hat{\psi}(t)$ quy định chỉ bởi thế tương tác V. Thật vậy, theo (3.5) và (3.6), ta có:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(t) &= i\mathcal{H}_0 e^{i\mathcal{H}_0 t} e^{-i\mathcal{H} t}\psi(0) - i e^{i\mathcal{H}_0 t}\mathcal{H} e^{-i\mathcal{H} t}\psi(0) \\
&= -i e^{i\mathcal{H}_0 t} V e^{-i\mathcal{H} t}\psi(0) \\
&= -i e^{i\mathcal{H}_0 t} V e^{-i\mathcal{H}_0 t} e^{i\mathcal{H}_0 t} e^{-i\mathcal{H} t}\psi(0) \\
&= -i\hat{V}(t)\,\hat{\psi}(t)\,.
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Tiến hóa của $\hat{\psi}(t)$ quả là chỉ phụ thuộc vào $\hat{V}(t)$, như ta muốn chỉ ra.

Để mô tả phụ thuộc thời gian (3.5), ta có thể viết

$$\hat{\psi}(t) = U(t)\,\psi(0), \tag{3.8}$$

trong đó toán tử $U(t)$ được định nghĩa là

$$U(t) = e^{i\mathcal{H}_0 t} e^{-i\mathcal{H} t}. \tag{3.9}$$

Toán tử $U(t)$ có ý nghĩa của toán tử tiến hóa thời gian, đã nhắc đến trong tiết 2.2, nhưng chưa xem xét cụ thể. Từ định nghĩa (3.8), (3.9) rõ ràng là, $U(t=0)=1$ và $U(t)$ thoả mãn cùng phương trình như (3.7) đối với $\hat{\psi}(t)$:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}U(t) &= i\,e^{i\mathcal{H}_0 t}\,(\mathcal{H}_0-\mathcal{H})\,e^{-i\mathcal{H}t}\\ &= -i\,\hat{V}(t)\,U(t)\,. \qquad (3.10)\end{aligned}$$

Giải phương trình này ta sẽ tìm được sự phụ thuộc của $U(t)$ vào thế tương tác $\hat{V}(t)$, và do đó xác định được $\hat{\psi}(t)$ (3.8). Muốn vậy, ta làm như sau:

Tích phân hai vế (3.10), cho

$$U(t)-U(0)=-i\int_0^t dt_1\hat{V}(t_1)\,U(t_1)$$

hay, vì $U(0)=1$,

$$U(t)=1-i\int_0^t dt_1\hat{V}(t_1)\,U(t_1)\,.$$

Ta lại có thể thay tiếp $U(t_1)$ dưới dấu tích phân bằng cùng quy trình $U(t_1)=1-i\int_0^{t_1}dt_2\hat{V}(t_2)\,U(t_2)$. Và, nếu sự thay thế như vậy lặp lại mãi, ta sẽ có:

$$\begin{aligned}U(t) &= 1-i\int_0^t dt_1\hat{V}(t_1)+(-i)^2\int_0^t dt_1\int_0^{t_1}dt_2\hat{V}(t_1)\,\hat{V}(t_2)+\dots\\ &= \sum_{n=0}^{\infty}(-i)^n\int_0^t dt_1\int_0^{t_1}dt_2\dots\int_0^{t_{n-1}}dt_n\hat{V}(t_1)\,\hat{V}(t_2)\dots\hat{V}(t_n)\,.\end{aligned}$$

(3.11)

Đây chính là lời giải của (3.10). Để ý là, các thời gian trong (3.11) tuân theo trật tự: $t>t_1>t_2>\dots>t_n$. Do tính chất này, ta có thể viết lại (3.11) dưới dạng gọn hơn bằng sử dụng toán tử trật tự thời gian (time ordering operator) T. Toán tử này có tính chất là, khi tác dụng lên một nhóm các toán tử phụ thuộc thời gian, nó sẽ sắp xếp các toán tử này lại theo trật tự sao cho, các toán tử ứng với thời gian sớm hơn sẽ nằm ở bên phải. Chẳng hạn,

$$T\left(\hat{V}(t_1)\,\hat{V}(t_2)\,\hat{V}(t_3)\right)=\hat{V}(t_3)\,\hat{V}(t_1)\,\hat{V}(t_2)\ \text{nếu}\ t_3>t_1>t_2.$$

Nếu sử dụng hàm bậc thang $\theta(t)$ thì tính chất này có thể biểu diễn dưới dạng chuẩn xác hơn:

$$T\left(\hat{V}(t_1)\,\hat{V}(t_2)\right) = \theta(t_1 - t_2)\,\hat{V}(t_1)\,\hat{V}(t_2) + \\ + \theta(t_2 - t_1)\,\hat{V}(t_2)\,\hat{V}(t_1)\,. \quad (3.12)$$

Tất nhiên, việc sắp xếp lại như vậy chỉ có ý nghĩa khi $\hat{V}(t_1)$ và $\hat{V}(t_2)$ không giao hoán với nhau.

Nhờ tính chất này của T, ta có thể viết, chẳng hạn:

$$\frac{1}{2!}\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 T\left(\hat{V}(t_1)\,\hat{V}(t_2)\right) =$$

$$= \frac{1}{2!}\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{V}(t_1)\,\hat{V}(t_2) \\ + \frac{1}{2!}\int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \hat{V}(t_2)\,\hat{V}(t_1)\,.$$

Vì hai số hạng bên vế phải thực ra là bằng nhau (t_1 và t_2 chỉ là các biến tích phân), nên có

$$\frac{1}{2!}\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 T\left(\hat{V}(t_1)\,\hat{V}(t_2)\right) = \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{V}(t_1)\,\hat{V}(t_2)\,.$$

Để ý là biểu thức bên phải chính là số hạng thứ ba trong tổng (3.11). Như vậy, sử dụng toán tử T ta có thể viết lại các số hạng của tổng (3.11) dưới dạng tương tự như vế trái của đẳng thức trên. Chẳng hạn, với số hạng thứ tư của tổng (3.11):

$$\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \hat{V}(t_1)\,\hat{V}(t_2)\,\hat{V}(t_3) = \\ \frac{1}{3!}\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \int_0^t dt_3 T\left(\hat{V}(t_1)\,\hat{V}(t_2)\,\hat{V}(t_3)\right)\,.$$

Kết quả là, chuỗi (3.11) có thể viết lại dưới dạng:

$$U(t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \ldots \\ \ldots \int_0^t dt_n T\left(\hat{V}(t_1)\,\hat{V}(t_2)\ldots\hat{V}(t_n)\right)\,. \quad (3.13)$$

Biểu thức này thường được viết gọn như sau:

$$U(t) = T\exp\left[-i\int_0^t dt_1\,\hat{V}(t_1)\right]. \tag{3.14}$$

Nhưng, cần chú ý là, dạng hàm e mũ chỉ là một dạng viết tắt của biểu thức đầy đủ (3.13).

3.1.4 S-matrận

Đây là một toán tử có vai trò đặc biệt quan trọng trong phương pháp hàm Green. S-matrận được định nghĩa bằng hệ thức:

$$\hat{\psi}(t) = S(t, t')\,\hat{\psi}(t'), \tag{3.15}$$

nghĩa là nó chuyển hàm $\hat{\psi}(t')$ thành $\hat{\psi}(t)$. Mặt khác theo (3.8) $\hat{\psi}(t') = U(t')\,\psi(0)$, nên ta có thể viết:

$$\hat{\psi}(t) = S(t, t')\,U(t')\,\psi(0) = U(t)\,\psi(0).$$

Từ đây suy ra:

$$S(t, t') = U(t)\,U^+(t'). \tag{3.16}$$

Với định nghĩa (3.15) dễ thấy S-matrận có các tính chất sau:

(1) $S(t, t) = U(t)\,U^+(t) = 1$

(2) $S^+(t, t') = U(t')\,U^+(t) = S(t', t)$

(3) $S(t, t')\,S(t', t'') = S(t, t'')$.

Hơn nữa, ta còn có

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}S(t, t') &= \frac{\partial}{\partial t}U(t)\,U^+(t') = -i\hat{V}(t)\,U(t)\,U^+(t')\\ &= -i\hat{V}(t)\,S(t, t'). \end{aligned} \tag{3.17}$$

nghĩa là S thoả mãn cùng một phương trình dạng (3.10) như đối với toán tử U. Do đó, phụ thuộc thời gian của $S(t)$ cũng có cùng dạng như (3.13) hay (3.14):

$$S(t, t') = T \exp\left\{-i\int_{t'}^{t} dt_1 \hat{V}(t_1)\right\} . \tag{3.18}$$

Trong toàn bộ dẫn giải ở trên còn một điều chưa rõ là hàm $\psi(0)$ trong (3.8) là gì ? Dễ thấy rằng đây là hàm sóng tại $t = 0$ trong cả ba biểu diễn, Schrödinger, Heisenberg và tương tác (nên có thể viết $\psi(0)$, không có mũ). Nó đóng vai trò đặc biệt vì là cơ sở xuất phát để xác định hàm sóng tại mọi thời điểm tiếp theo. Nhưng, chính hàm $\psi(0)$ lại chưa biết! Liệu có thể xây dựng một lý thuyết dựa trên một hàm chưa biết ?

Trở lại biểu thức (3.4) trong biểu diễn tương tác, trong đó $\mathcal{H}_0$ được chọn sao cho ta có thể tìm chính xác hàm riêng và trị riêng của nó. Gọi ϕ_0 là hàm sóng trạng thái cơ bản của $\mathcal{H}_0$. Có chăng một hệ thức giữa $\psi(0)$ (chưa biết) và ϕ_0 (đã biết) ? Một hệ thức mong muốn như vậy đã được Gell-Mann và Low đề xuất năm 1951 (Gell-Mann and Low (1951)):

$$\psi(0) = S(0, -\infty)\, \phi_0 . \tag{3.19}$$

Ta có thể hiểu hệ thức này như sau. Theo định nghĩa (3.15),

$$\hat{\psi}(t) = S(t, 0)\, \psi(0) .$$

Tác dụng $S(0, t)$ lên hai vế của đẳng thức này, có

$$\begin{aligned} S(0, t)\, \hat{\psi}(t) &= S(0, t)\, S(t, 0)\, \psi(0) \\ &\equiv \psi(0) . \end{aligned}$$

Bây giờ, nếu cho $t \to -\infty$, thì đẳng thức trên chuyển thành

$$\psi(0) = S(0, -\infty)\, \hat{\psi}(-\infty) .$$

Bước quan trọng tiếp theo là, nếu ta đồng nhất $\hat{\psi}(-\infty)$ với ϕ_0 thì ta sẽ nhận được chính xác (3.19). Hiểu thế nào về sự đồng nhất này? Trong quá khứ xa, $t \to -\infty$, khi chưa có tương tác V, trạng thái của hệ được mô tả chính

xác bởi ϕ_0. Vai trò của toán tử $S(0, -\infty)$ là chuyển đoạn nhiệt hàm sóng ϕ_0 này ở $t = -\infty$ thành $\psi(0)$ ở $t = 0$. Trong quá trình chuyển đó tương tác được đưa vào dần dần một cách đoạn nhiệt sao cho đến thời điểm $t = 0$ tương tác được đưa vào trọn vẹn, hàm sóng chứa đầy đủ hiệu ứng của tương tác, và do đó, chính là hàm riêng của Hamiltonian toàn phần $\mathcal{H}$.

Hệ thức (3.19) đóng vai trò then chốt trong phương pháp hàm Green. Để hiểu thêm, ta nhìn nhận (3.19) từ một giới hạn khác của t, $t \to +\infty$. Khi đó,

$$\hat{\psi}(\infty) = S(\infty, 0)\,\psi(0)\ .$$

Ta có thể giả thiết rằng $\hat{\psi}(\infty)$ liên quan trở lại với chính ϕ_0, chẳng hạn chúng khác nhau chỉ một nhân tử pha:

$$\hat{\psi}(\infty) = \phi_0\, e^{i\alpha}\,. \tag{3.20}$$

Với giả thiết này, cùng với (3.19), ta có

$$\begin{aligned}\phi_0\, e^{i\alpha} &= S(\infty, 0)\,\psi(0)\\ &= S(\infty, 0)\,S(0, -\infty)\,\phi_0\\ &= S(\infty, -\infty)\,\phi_0\,.\end{aligned}$$

Từ đây, ta xác định được nhân tử pha trong (3.20).

$$e^{i\alpha} = \langle\phi_0|\,S(\infty, -\infty)\,|\phi_0\rangle\ . \tag{3.21}$$

Hệ thức này sẽ được sử dụng khi biểu diễn các hàm Green qua S-matrận.

3.2 Hàm Green electron: nhiệt độ không

Trong Phụ lục C ta đã biết rằng, các hàm Green một hạt đơn lẻ khảo sát trong chương 2 có thể biểu diễn qua các toán tử trường. Các kết quả này có thể tổng quát hóa để định nghĩa hàm Green cho một hệ có tương tác với Hamiltonian toàn phần $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$, trong đó $\mathcal{H}_0$ là phần không nhiễu loạn có thể giải chính xác.

3.2.1 Định-nghĩa

Ở nhiệt độ không, hàm Green electron được định nghĩa là

$$G(p, t-t') = -i\left\langle \left| T\, C_p(t)\, C_p^+(t') \right| \right\rangle , \tag{3.22}$$

trong đó $C_p(t)$, $C_p^+(t')$ là các toán tử trong biểu diễn Heisenberg:

$$\begin{aligned} C_p(t) &= e^{i\mathcal{H}t}\, C_p\, e^{-i\mathcal{H}t}, \\ C_p^+(t) &= e^{i\mathcal{H}t}\, C_p^+\, e^{-i\mathcal{H}t}, \end{aligned} \tag{3.23}$$

với C_p mô tả trạng thái của $\mathcal{H}_0$; p là tập các số lượng tử xác định trạng thái trong bài toán khảo sát (chẳng hạn với electron tự do thì đó là vectơ sóng **k** và spin σ); T là toán tử trật tự thời gian; $|\rangle$ là trạng thái cơ bản của Hamiltonian toàn phần $\mathcal{H}$ (vì (3.22) viết trong biểu diễn Heisenberg nên $|\rangle$ không phụ thuộc thời gian).

Khi viết hàm Green với chỉ một biến thời gian như trong (3.22) ta ngụ ý vế phải của biểu thức này phụ thuộc chỉ vào $(t - t') = \tau$. Điều này dễ dàng kiểm tra bằng cách thay trực tiếp (3.23) vào (3.22). Khi đó, chẳng hạn với $t > t'$, ta có:

$$G(p, t > t') = -i\left\langle \left| \left(e^{i\mathcal{H}t}\, C_p\, e^{-i\mathcal{H}t}\right) \left(e^{i\mathcal{H}t'}\, C_p^+\, e^{-i\mathcal{H}t'}\right) \right| \right\rangle .$$

Nếu E_0 là năng lượng trạng thái cơ bản của hệ, $\mathcal{H}\,|\rangle = E_0\,|\rangle$, thì

$$G(p, t > t') = -i\, e^{iE_0(t-t')} \left\langle \left| C_p\, e^{-i\mathcal{H}(t-t')}\, C_p^+ \right| \right\rangle . \tag{3.24}$$

Rõ ràng là vế phải của (3.24) phụ thuộc chỉ vào $(t - t')$. Biểu thức trên đồng thời cho phép ta lý giải ý nghĩa của hàm Green $G(p, t > t')$. Một hạt (kích thích) được sinh ra, lan truyền trong khoảng thời gian $(t - t')$, rồi bị hủy và hệ trở lại trạng thái ban đầu (không kích thích).

Tương tự, hàm Green

$$G(p, t' > t) = +i\left\langle \left| C_p^+(t')\, C_p(t) \right| \right\rangle$$

mô tả xác suất của quá trình, trong đó một electron bị hủy khỏi trạng thái cơ bản (sinh một lỗ trống) ở thời điểm t, và sau đó, tái sinh (hủy lỗ trống) ở thời điểm t'.

Vì hàm Green mô tả sự truyền của hạt (kích thích) như vậy, nên thường được gọi là hàm truyền (propagator).

Biến đổi Fourier của hàm Green phụ thuộc thời gian (3.22) cho ta hàm Green phụ thuộc tần số:

$$G(p,\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau\, G(p,\tau)\, e^{i\omega\tau}, \quad (3.25)$$

$$G(p,\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G(p,\omega)\, e^{-i\omega\tau}. \quad (3.26)$$

Trong thực tế tính toán, hàm Green tần số thường được sử dụng phổ biến và thuận tiện hơn các hàm thời gian.

Biểu thức định nghĩa (3.22) có thể viết lại trong biểu diễn tương tác bằng cách như sau.

Gọi $|\rangle_0 \equiv \phi_0$ là trạng thái cơ bản của $\mathcal{H}_0$. Theo (3.19) ta có thể thay $|\rangle$ trong (3.22) bằng

$$|\rangle = S(0,-\infty)\,|\rangle_0 \quad (3.27)$$

Đồng thời, các toán tử cũng được chuyển sang biểu diễn tương tác (theo (3.6) và (3.23)):

$$\begin{aligned} C_p(t) &= e^{i\mathcal{H}t} e^{-i\mathcal{H}_0 t}\, \hat{C}_p(t)\, e^{i\mathcal{H}_0 t} e^{-i\mathcal{H}t} \\ &= U^+(t)\, \hat{C}_p(t)\, U(t) = S(0,t)\, \hat{C}_p(t)\, S(t,0). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Thay (3.27) và (3.28) cùng hai biểu thức tương ứng $\langle| = {}_0\langle|\, S(-\infty,0)$ và

$$C_p^+(t') = S(0,t')\, \hat{C}_p^+(t')\, S(t',0)$$

vào (3.22), ta được:

$$\begin{aligned} G(p,t-t') = &-i\theta(t-t')\ {}_0\langle|\, S(-\infty,0)\, S(0,t)\, \hat{C}_p(t)\, S(t,0) \\ &\quad S(0,t')\, \hat{C}_p^+(t')\, S(t',0)\, S(0,-\infty)\,|\rangle_0 \\ &+ i\theta(t'-t)\ {}_0\langle|\, S(-\infty,0)\, S(0,t')\, \hat{C}_p^+(t')\, S(t',0) \\ &\quad S(0,t)\, \hat{C}_p(t)\, S(t,0)\, S(0,-\infty)\,|\rangle_0 . \end{aligned}$$

Sử dụng các tính chất của S-matrận để gộp các thừa số, đồng thời, sử dụng (2.21) để thay thế

$$
\begin{aligned}
{}_0\langle|\, S(-\infty, 0) &= e^{-i\alpha}\, {}_0\langle|\, S(\infty, -\infty)\, S(-\infty, 0) \\
&= \frac{{}_0\langle|\, S(\infty, 0)}{{}_0\langle|\, S(\infty, -\infty)\, |\rangle_0},
\end{aligned}
$$

biểu thức hàm Green ở trên sẽ chuyển được về dạng đơn giản hơn:

$$
\begin{aligned}
G(p, t - t') = -\frac{i}{{}_0\langle|\, S(\infty, -\infty)\, |\rangle_0} \Big[&\theta(t - t')\, {}_0\langle|\, S(\infty, t)\, \hat{C}_p(t) \\
&S(t, t')\, \hat{C}_p^+(t')\, S(t', -\infty)\, |\rangle_0 \\
&-\theta(t' - t)\, {}_0\langle|\, S(\infty, t')\, \hat{C}_p^+(t') \\
&S(t', t)\, \hat{C}_p(t)\, S(t, -\infty)\, |\rangle_0 \Big].
\end{aligned}
$$

Ta có thể tiếp tục rút gọn biểu thức này bằng sử dụng toán tử T. Chẳng hạn, với số hạng đầu

$$
\begin{aligned}
&\theta(t - t')\, {}_0\langle|\, S(\infty, t)\, \hat{C}_p(t)\, S(t, t')\, \hat{C}_p^+(t')\, S(t', -\infty)\, |\rangle_0 \\
&\qquad = \theta(t - t')\, {}_0\langle|\, T\hat{C}_p(t)\, \hat{C}_p^+(t')\, S(\infty, -\infty)\, |\rangle_0
\end{aligned}
$$

Số hạng thứ hai cũng chuyển về dạng tương tự. Ở đây, chú ý là, sở dĩ ta có thể gộp ba toán tử S, ứng với ba khoảng thời gian khác nhau, thành $S(\infty, -\infty)$ vì toán tử T sẽ sắp xếp lại chúng vào trật tự cần thiết. Thành thử, cuối cùng, hàm Green toàn phần (3.22) được viết lại trong biểu diễn tương tác dưới dạng:

$$
G(p, t - t') = -i\, \frac{{}_0\langle|\, T\, \hat{C}_p(t)\, \hat{C}_p^+(t')\, S(\infty, -\infty)\, |\rangle_0}{{}_0\langle|\, T\, S(\infty, -\infty)\, |\rangle_0}. \qquad (3.29)
$$

Trong trường hợp riêng, khi không có tương tác ($V = 0$), thì matrận S là matrận đơn vị, hàm Green không tương tác (hay hàm Green tự do, hàm Green không nhiễu loạn, ký hiệu là G_0) có dạng giản đơn:

$$
G_0(p, t - t') = -i\, {}_0\langle|\, T\, \hat{C}_p(t)\, \hat{C}_p^+(t')\, |\rangle_0 . \qquad (3.30)
$$

Các hàm Green tự do đóng vai trò quan trọng trong hình thức luận hàm Green không chỉ với tư cách hàm Green mô tả hạt không tương tác, mà chúng còn là cơ sở để tính hàm Green của hệ có tương tác.

3.2.2 Ví dụ: hai hàm Green tự do quan trọng

Trong các biểu thức định nghĩa (3.29) và (3.30), dạng của hàm sóng trạng thái cơ bản $|\rangle_0$ tùy thuộc bài toán khảo sát. Xét hai ví dụ đơn giản, nhưng rất có ý nghĩa trong ứng dụng.

Ví dụ 1: Hạt đơn lẻ trong vùng trống.

Xét trường hợp trong vùng năng lượng chỉ có một electron, chẳng hạn, một electron trong vùng dẫn của bán dẫn. Trong trường hợp này, trạng thái cơ bản là chân không (không có hạt nào), ký hiệu là $|0\rangle$. Trạng thái này có tính chất $C_p\,|0\rangle = 0$. Thành ra, số hạng ($t' > t$) trong (3.22) là bằng không, và ta chỉ còn

$$G(p,\,t-t') = -\,i\,\theta\,(t-t')\,\langle 0|\,\hat{C}_p\,(t)\,\hat{C}_p^+\,(t')\,|\,0\rangle\;. \tag{3.31}$$

Trong trường hợp không có tương tác ($V = 0$), thì $C_p^+\,|\,0\rangle$ chính là trạng thái một hạt tự do (xem ví dụ ở tiết 2.2) và do đó hàm Green (3.31) có dạng đơn giản:

$$G_0\,(p,\,t-t') = -\,i\,\theta\,(t-t')\;e^{-i\,E_p(t-t')} \tag{3.32}$$

với E_p là năng lượng của hạt. Biến đổi Fourier của hàm này cho

$$\begin{aligned} G_0\,(p,\,E) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau\,e^{i\,E\tau}G_0\,(p,\,\tau) \\ &= -\,i\int_0^{\infty} d\tau\,e^{i\,(E-E_p+i\delta)\tau}\,. \end{aligned}$$

Ở đây, lượng $i\,\delta$ ($\delta \to 0_+$) được phụ vào số mũ để đảm bảo cho tích phân luôn hội tụ (xem B3.2). Kết quả lấy tích phân cho

$$G_0\,(p,\,E) = \frac{1}{E - E_p + i\delta}\;\;;\;\;\delta \to 0_+\,. \tag{3.33}$$

Đây chính là hàm Green năng lượng (tương ứng với hàm Green thời gian (3.32)) của một hạt đơn lẻ trong một vùng trống.

Ví dụ 2: Khí electron suy biến.

Xét bài toán một electron trong biển Fermi ở nhiệt độ không. Nếu E_k là năng lượng không nhiễu loạn (ứng với $\mathcal{H}_0$), thì tất cả các trạng thái với E_k thấp hơn thế hóa học μ (hay vectơ sóng k nhỏ hơn vectơ sóng Fermi k_F) là đầy, và ngược lại, các trạng thái với $E_k > \mu$ (hay $k > k_F$) là trống (xem tiết 1.1). Ta có thể chọn μ làm gốc tính năng lượng và đưa vào tham số $\xi_k = E_k - \mu$. Khi đó, với bài toán đang khảo sát ta có:

$$\begin{aligned} {}_0\langle|\, C_k^+ C_k \,|\rangle_0 &= \theta(-\xi_k)\,, \\ {}_0\langle|\, C_k C_k^+ \,|\rangle_0 &= \theta(\xi_k)\,. \end{aligned}$$

Do đó, hàm Green tự do (3.30) bây giờ có dạng

$$\begin{aligned} G_0(k, t-t') &= -i\,[\theta(t-t')\,\theta(\xi_k) - \theta(t'-t)\,\theta(-\xi_k)] \\ &\qquad \cdot \exp[-i\,\xi_k\,(t-t')]\,. \end{aligned} \tag{3.34}$$

Biến đổi Fourier của hàm này là

$$\begin{aligned} G_0(k, E) &= -i\left[\theta(\xi_k)\int_0^\infty d\tau\, e^{i\tau(E-\xi_k+i\delta)}\right. \\ &\qquad \left. - \theta(-\xi_k)\int_{-\infty}^0 d\tau\, e^{i\tau(E-\xi_k-i\delta)}\right] \\ &= \frac{\theta(\xi_k)}{E-\xi_k+i\delta} + \frac{\theta(-\xi_k)}{E-\xi_k-i\delta}\,;\ \delta \to 0_+\,. \end{aligned} \tag{3.35}$$

Ở đây, chú ý là, ξ_k là năng lượng tính từ mức Fermi, nên $\xi_k\,(k = k_F) = 0$. Biểu thức (3.35) có thể viết gọn lại:

$$G_0(k, E) = \frac{1}{E - \xi_k + i\delta\,\mathrm{sgn}(\xi_k)}\,;\ \delta \to 0_+\,. \tag{3.36}$$

Các hàm Green không nhiễu loạn (3.32) và (3.34) hay (3.33) và (3.36) có vai trò quan trọng trong lý thuyết hàm Green áp dụng vào Vật lý chất rắn. Chúng được dùng làm cơ sở để tính các hàm Green tương tác.

3.3 Hàm Green electron: nhiệt độ hữu hạn

Mọi thí nghiệm đều được tiến hành ở nhiệt độ hữu hạn, nên để giải thích thực nghiệm, về nguyên tắc, các lý thuyết cho trường hợp nhiệt độ không là không còn thích hợp nữa, dù rằng, trong thực tế nếu nhiệt độ đủ thấp so với các năng lượng của hệ thì các lý thuyết này vẫn rất hữu ích. Matsubara (Matsubara 1950) là người đầu tiên đề xuất phương pháp hàm Green cho trường hợp nhiệt độ hữu hạn (hàm Green nhiệt độ). Phương pháp này không chỉ hiệu quả, mà còn rất dễ nắm bắt. Hơn nữa, từ các kết quả nhận được cho trường hợp nhiệt độ hữu hạn, bằng đơn giản cho $T = 0$ ta sẽ nhận được các kết quả tương ứng cho trường hợp nhiêt độ không. Vì vậy, trong tiết trước ta đã không đi sâu vào các tính chất giải tích của hàm Green nhiệt độ không. Chúng sẽ được xem xét ở tiết này cho trường hợp tổng quát hơn của hàm Green nhiệt độ hữu hạn.

3.3.1 Hình thức luận Matsubara

Ở nhiệt độ khác không mỗi hạt được xem là tương tác với biển các hạt khác. Ta không biết trạng thái chính xác của biển hạt này, vì chúng luôn thăng giáng từ cấu hình này sang cấu hình khác. Tham số duy nhất mà ta biết là nhiệt độ, liên quan với năng lượng trung bình của hệ. Vì vậy, khi xác định hàm Green nhiệt độ, thay vì trung bình theo trạng thái cơ bản như trong (3.22), ta phải làm việc với trung bình nhiệt động. Theo định nghĩa, trung bình nhiệt động của đại lượng Q là:

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle &= \mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta\mathcal{H}}Q\right\}/\,\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta\mathcal{H}}\right\} \\ &\equiv Z^{-1}\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta\mathcal{H}}Q\right\}, \end{aligned} \tag{3.37}$$

trong đó $\mathcal{H}$ là Hamiltonian toàn phần của hệ; $\beta \equiv (k_B T)^{-1}$; Tr là phép lấy. vết như đã giới thiệu ở chương 2.

Với trung bình nhiệt động, trong biểu thức của hàm Green, Hamiltonian $\mathcal{H}$ (và do đó thế tương tác V) sẽ có mặt không chỉ ở nhân tử dạng $\exp(\pm i\mathcal{H}t)$ như trong hàm Green nhiệt độ không, mà còn cả ở nhân tử $\exp(-\beta\mathcal{H})$. Nhân-tử dạng $\exp(\pm i\mathcal{H}t)$ có thể biểu diễn qua S-matrận như

ở (3.29), rồi khai triển như (3.18). Còn nhân tử $\exp(-\beta\mathcal{H})$? Ý tưởng chính của Matsubara là xem thời gian t và nghịch đảo nhiệt độ β như phần thực và phần ảo của một biến phức duy nhất, và do đó, ta chỉ cần một khai triển S-matrận. Ý tưởng này xuất hiện một cách tự nhiên, nếu tương tự như hệ thức (3.2) với toán tử Heisenberg, ta viết $e^{\beta\mathcal{H}}C_p(0)\,e^{-\beta\mathcal{H}} = C_p(-i\beta)$, trong đó β đóng vai trò như phần ảo của thời gian.

Vì thời gian liên quan với tần số, một khi có thay đổi trong khái niệm thời gian, tất phải có thay đổi tương ứng về tần số cũng như dạng thức của phép biến đổi Fourier. Để hiểu điều này, ta bắt đầu bằng xem xét các số choán đầy nhiệt đối với boson $n_B(\omega_q) = \left(e^{\beta\omega_q} - 1\right)^{-1}$ và fermion $n_F(\xi_k) = \left(e^{\beta\xi_k} + 1\right)^{-1}$. Các đại lượng này có thể khai triển thành chuỗi (xem Mahan 2000):

$$n_F(\xi_k) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{1}{(2n+1)\,i\pi/\beta - \xi_k}, \tag{3.38}$$

$$n_B(\omega_q) = -\frac{1}{2} + \frac{1}{\beta}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{1}{(2ni\pi/\beta)\,i\pi/\beta - \omega_q}. \tag{3.39}$$

Khai triển này là dựa trên định lý cho rằng một hàm phân hình (meromorphic) bất kỳ luôn có thể khai triển thành tổng theo các cực của nó và các thặng dư tương ứng. Số choán đầy boson $n_B(\omega_q)$ có cực tại $\omega_q = 2n\,i\pi/\beta$, còn số choán đầy fermion $n_F(\xi_k)$ có cực tại $\xi_k = (2n+1)\,i\pi/\beta$. Với cả hai trường hợp thặng dư ở các cực đều là $1/\beta$.

Từ (3.38) và (3.39) ta có thể đưa vào khái niệm tần số ở các cực, tương ứng là:

$$\omega_n = \begin{cases} (2n+1)\,\pi/\beta\,, & \text{với fermion}\,, \\ 2n\pi/\beta\,, & \text{với boson}\,. \end{cases} \tag{3.40}$$

Các fermion có cực tại các tần số bằng một số lẻ lần của π/β, còn các boson có cực tại các tần số bằng số chẵn lần của π/β (kể cả $\omega_n = 0$). Với định nghĩa (3.40) các tổng ở (3.38) và (3.39) trở nên có dạng đơn giản:

$$\sum_n \frac{1}{i\,\omega_n - \xi_k} \quad \text{và} \quad \sum_n \frac{1}{i\,\omega_n - \omega_q}. \tag{3.41}$$

Trong tổng thứ nhất (fermion) n là các số lẻ, còn trong tổng thứ hai (boson) n là các số chẵn. Để ý thêm là, các số hạng trong tổng,

$$\frac{1}{i\,\omega_n - \xi_k} \quad \text{và} \quad \frac{1}{i\,\omega_n - \omega_q}, \tag{3.42}$$

có dạng của các hàm Green. Ngay dưới đây ta sẽ thấy chúng chính là các hàm Green không nhiễu loạn trong phương pháp Matsubara.

Sự khác nhau giữa boson và fermion về giá trị có thể của tần số ω_n hẳn là sẽ được thể hiện trong công thức biến đổi Fourier. Trong hình thức luận Matsubara thời gian trở thành một đại lượng phức, $\tau = i\,t$ với miền xác định

$$-\beta \leq \tau \leq \beta\,. \tag{3.43}$$

Ta biết, nếu hàm $f(\tau)$ xác định trong miền (3.43), thì nó có khai triển Fourier dạng:

$$f(\tau) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\left[a_n \cos\left(\frac{n\pi\tau}{\beta}\right) + b_n \sin\left(\frac{n\pi\tau}{\beta}\right)\right], \tag{3.44}$$

trong đó

$$a_n = \frac{1}{\beta}\int_{-\beta}^{\beta} d\tau\, f(\tau)\cos\left(\frac{n\pi\tau}{\beta}\right);$$
$$b_n = \frac{1}{\beta}\int_{-\beta}^{\beta} d\tau\, f(\tau)\sin\left(\frac{n\pi\tau}{\beta}\right).$$

Ta biểu diễn khai triển (3.44) dưới một dạng khác, bằng định nghĩa

$$f(i\,\omega_n) = \frac{1}{2}\beta\,(a_n + i\,b_n)\,.$$

Khi đó, rõ ràng $f(\tau)$ (3.44) chính là

$$f(\tau) = \frac{1}{\beta}\sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(-i\,n\pi\tau/\beta)\, f(i\omega_n)\,; \tag{3.45}$$

và

$$f(i\,\omega_n) = \frac{1}{2}\int_{-\beta}^{\beta} d\tau\, f(\tau)\exp(i\,n\pi\tau/\beta)\,. \tag{3.46}$$

Ta có thể đơn giản tiếp các biểu thức này nếu tính đến đặc thù của từng loại hạt.

Với boson. Theo (3.40), nếu $f(\tau)$ là một hàm boson thì:

$$f(\tau) = f(\tau + \beta) \ ; \ -\beta < \tau < 0 . \tag{3.47}$$

Khi đó có thể viết lại (3.46):

$$f(i\,\omega_n) = \frac{1}{2}\left\{\int_0^\beta d\tau\, f(\tau)\, e^{i\,n\pi\tau/\beta} + \int_{-\beta}^0 d\tau\, f(\tau)\, e^{i\,n\pi\tau/\beta}\right\} .$$

Ở số hạng thứ hai bên phải thay τ bằng $\tau + \beta$, có:

$$f(i\,\omega_n) = \frac{1}{2}\left(1 + e^{i\,n\pi}\right)\int_0^\beta d\tau\, f(\tau)\, e^{i\,n\pi\tau/\beta} . \tag{3.48}$$

Vế phải của đẳng thức trên sẽ bằng không nếu n là một số lẻ. Điều này nghĩa là, phù hợp với thảo luận ở trên, với boson, hàm $f(i\,\omega_n)$ chỉ khác không nếu n là một số chẵn. Khi đó, $e^{i\,n\pi} = 1$, các hệ thức (3.48) và (3.46) trở nên có dạng:

$$\begin{aligned} f(i\,\omega_n) &= \int_0^\beta d\tau\, f(\tau)\, e^{i\,\omega_n\tau}, \\ f(\tau) &= \frac{1}{\beta}\sum_n e^{-\,i\,\omega_n\tau} f(i\,\omega_n), \\ \omega_n &= 2n\pi/\beta \equiv 2n\pi\, k_B T . \end{aligned} \tag{3.49}$$

Với boson, tần số chỉ nhận các giá trị bằng số chẵn lần của π/β.

Với fermion. Nếu $f(\tau)$ là một hàm fermion thì, theo (3.40):

$$f(\tau) = -\,f(\tau + \beta) \ ; \ -\beta < \tau < 0. \tag{3.50}$$

Sử dụng tính chất này, tương tự như với boson, ta nhận được các hệ thức sau cho biến đổi Fourier của các hàm fermion:

$$\begin{aligned} f(i\,\omega_n) &= \int_0^\beta d\tau\, f(\tau)\, e^{i\,\omega_n\tau}, \\ f(\tau) &= \frac{1}{\beta}\sum e^{-\,i\,\omega_n\tau} f(i\,\omega_n), \\ \omega_n &= (2n+1)\,\pi/\beta \equiv (2n+1)\,\pi\, k_B T . \end{aligned} \tag{3.51}$$

Các hệ thức (3.49) và (3.51) có cùng dạng, chỉ khác nhau ở tần số: với fermion, tần số ω_n chỉ nhận các giá trị bằng một số lẻ lần của π/β.

Việc đưa vào thời gian và tần số phức thoạt đầu làm ta có cảm giác phức tạp. Trong thực tế, các hệ thức biến đổi Fourier (3.49) và (3.51) có dạng đơn giản quen thuộc. Hơn nữa, phương pháp Matsubara rất thuận tiện trong tính toán, nhất là khi sử dụng kỹ thuật giản đồ Feynman.

3.3.2 Định nghĩa

Hàm Green electron nhiệt độ được định nghĩa là

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(p, \tau - \tau') &= -\left\langle T\, C_p(\tau)\, C_p^+(\tau')\right\rangle , \\ &= -Z^{-1}\,\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta(\mathcal{H}-\mu N)}\, T\, C_p(\tau)\, C_p^+(\tau')\right\} , \end{aligned} \tag{3.52}$$

trong đó p có ý nghĩa như ở (3.22),

$$\begin{aligned} Z &= \mathrm{Tr}\{\exp[-\beta(\mathcal{H}-\mu N)]\} , \\ C_p(\tau) &= \exp[\tau(\mathcal{H}-\mu N)]\, C_p \exp[-\tau(\mathcal{H}-\mu N)] , \\ C_p^+(\tau) &= \exp[\tau(\mathcal{H}-\mu N)]\, C_p^+ \exp[-\tau(\mathcal{H}-\mu N)] . \end{aligned} \tag{3.53}$$

Dòng thứ hai trong định nghĩa (3.52) giải thích nội dung của trung bình $< \ldots >$ ghi ở dòng trên. Đó là trung bình nhiệt động viết cho trường hợp tổng quát của các tập hợp chính tắc lớn (grand canonical ensemble), trong đó Hamiltonian $\mathcal{H}$ được thay bằng $(\mathcal{H} - \mu N)$ với μ là thế hóa học, N là số hạt (xem, chẳng hạn, Toda *et al.* 1983). Toán tử trật tự thời gian T tác dụng tương tự như ở trường hợp nhiệt độ không: nó sắp xếp các toán tử với τ sớm hơn (gần $-\beta$ hơn) nằm về phía bên phải. Với bài toán một hạt đơn lẻ thì $\mu = 0$ và trung bình nhiệt động được hiểu theo nghĩa (3.37). Để ý thêm là, trong định nghĩa trên, phụ thuộc τ của các toán tử (3.53) có dạng như toán tử Heisenberg (3.2) với it thay bằng τ.

Bằng thay trực tiếp (3.53) vào (3.52) và sử dụng tính hoán vị vòng quanh của phép lấy vết:

$$\mathrm{Tr}\{A\,B\,C \ldots Y\,Z\} = \mathrm{Tr}\{B\,C \ldots Y\,Z\,A\} , \tag{3.54}$$

ta dễ thấy rằng, quả là vế phải của (3.52) phụ thuộc chỉ vào hiệu $(\tau - \tau')$ như ghi ở vế trái. Do tính chất này ta luôn có thể chọn $\tau' = 0$ và viết lại biểu thức định nghĩa (3.52) dưới dạng

$$\mathcal{G}(p, \tau) = -\left\langle T\, C_p(\tau)\, C_p^+(0)\right\rangle . \tag{3.55}$$

$$= -Z^{-1}\,\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta\mathcal{K}}\, T\, \left(e^{\tau\mathcal{K}}\, C_p\, e^{-\tau\mathcal{K}}\, C_p^+\right)\right\} .$$

Ở đây, để cho gọn, ta dùng ký hiệu $\mathcal{K} = \mathcal{H} - \mu N$.

Để tìm hàm Green phụ thuộc tần số tương ứng với (3.55) ta cần biết tính chất phụ thuộc τ của $\mathcal{G}(p, \tau)$. Xét, chẳng hạn, trường hợp $\tau < 0$, khi (3.55) có dạng

$$\mathcal{G}(p, \tau) = \left\langle T\, C_p^+(0)\, e^{\tau\mathcal{K}}\, C_p\, e^{-\tau\mathcal{K}}\right\rangle$$

$$= Z^{-1}\,\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta\mathcal{K}}\, C_p^+\, e^{\tau\mathcal{K}}\, C_p\, e^{-\tau\mathcal{K}}\right\} .$$

Để ý rằng, biểu thức đã đổi dấu do hoán vị hai toán tử fermion. Nhân thêm $e^{-\beta\mathcal{K}}.e^{\beta\mathcal{K}} \equiv 1$ vào sau C_p^+ rồi sử dụng tính chất (3.54) của Tr, ta có

$$\mathcal{G}(p, \tau) = Z^{-1}\,\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta\mathcal{K}}\, e^{(\tau+\beta)\mathcal{K}}\, C_p\, e^{-(\tau+\beta)\mathcal{K}} C_p^+\right\}$$

$$\equiv -\mathcal{G}(p, \tau+\beta) \ ; \ 0 < \tau + \beta < \beta ,$$

hay

$$\mathcal{G}(p, \tau) = -\mathcal{G}(p, \tau+\beta) \ ; \ -\beta < \tau < 0 .$$

Ta thấy, hàm Green electron $\mathcal{G}(p, \tau)$ có tính chất (3.50) của các hàm fermion. Và, do đó, nó biến đổi Fourier theo quy tắc (3.51):

$$\mathcal{G}(p, i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau\, \mathcal{G}(p, \tau)\, e^{i\omega_n\tau} , \tag{3.56}$$

$$\mathcal{G}(p, \tau) = \frac{1}{\beta}\sum e^{-i\omega_n\tau}\, \mathcal{G}(p, i\omega_n) , \tag{3.57}$$

trong đó tần số ω_n nhận các giá trị bằng một số lẻ lần của π/β. Biểu thức (3.56) chính là hàm Green electron phụ thuộc tần số.
Ví dụ: hệ hạt tự do (không tương tác).

Trong trường hợp đơn giản này ta có

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_0 = \sum \varepsilon_p C_p^+ C_p , \\ \mathcal{K} &= \mathcal{K}_0 = \sum \xi_p C_p^+ C_p , \end{aligned} \tag{3.58}$$

với

$$\xi_p = \varepsilon_p - \mu . \tag{3.59}$$

Phụ thuộc τ của toán tử $C_p(\tau)$ trong (3.55) bây giờ có dạng

$$C_p(\tau) = e^{\tau \mathcal{K}_0} C_p e^{-\tau \mathcal{K}_0} = e^{-\xi_p \tau} C_p . \tag{3.60}$$

Dấu bằng thứ hai trong hệ thức trên là hệ quả của $\mathcal{K}_0$ (3.58) và định lý Baker-Hausdorff:

$$\begin{aligned} e^A C e^{-A} &= C + [A, C] + \frac{1}{2!}[A, [A, C]] + \\ &+ \frac{1}{3!}[A, [A, [A, C]]] + \dots \end{aligned}$$

Thay (3.60) vào (3.55) ta được dạng phụ thuộc thời gian của hàm Green tự do (không tương tác):

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_0(p, \tau) &= -\theta(\tau) e^{-\xi_p \tau} \langle C_p C_p^+ \rangle + \theta(-\tau) e^{-\xi_p \tau} \langle C_p^+ C_p \rangle \\ &= -e^{-\xi_p \tau} [\theta(\tau)(1 - n_F(\xi_p)) - \theta(-\tau) n_F(\xi_p)] \\ &= -e^{-\xi_p \tau} [\theta(\tau) - n_F(\xi_p)] , \end{aligned} \tag{3.61}$$

trong đó $n_F(\xi_p) \equiv \langle C_p^+ C_p \rangle$ là trung-bình của toán-tử số hạt

$$n_F(\xi_p) = \left(e^{\beta \xi_p} + 1\right)^{-1} .$$

Thay (3.61) vào (3.56) ta được dạng phụ thuộc tần số của hàm Green electron tự do.

$$\mathcal{G}_0(p, i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau\, e^{i\omega_n\tau}\, \mathcal{G}_0(p, \tau) = -(1-n_F)\int_0^\beta d\tau\, e^{\tau(i\omega_n - \xi_p)}$$

$$= \frac{(1-n_F)\left(e^{\beta(i\omega_n - \xi_p)} - 1\right)}{i\omega_n - \xi_p}.$$

Vì với electron $i\beta\omega_n = i(2n+1)\pi$, nên ở thừa số thứ hai trên tử số ta có $e^{i\beta\omega_n}.e^{-\beta\xi_p} = -e^{-\beta\xi_p}$, và biểu thức trên trở thành

$$\mathcal{G}_0(p, i\omega_n) = \frac{(1-n_F)\left(e^{-\beta\xi_p} + 1\right)}{i\omega_n - \xi_p}.$$

Thay $1 - n_F = e^{\beta\xi_p}/\left(e^{\beta\xi_p} + 1\right)$, ta được kết quả cuối cùng:

$$\mathcal{G}_0(p, i\omega_n) = 1/(i\omega_n - \xi_p). \qquad (3.62)$$

Hàm Green electron tự do phụ thuộc tần số (3.62) có dạng trùng với số hạng trong tổng (3.41) như đã giới thiệu ở trên. Trong hàm (3.62), nhiệt độ T có mặt ở tần số $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta \equiv (2n+1)\pi k_B T$.

3.3.3 Một số tính chất cơ bản

Tất cả các đại lượng đo trong thực tế, như độ dẫn điện hay độ cảm từ, đều liên quan trực tiếp với hàm Green trễ. Hàm này, tất nhiên có thể tính trực tiếp trong khuôn khổ hình thức luận thời gian thực quen thuộc (xem, chẳng hạn, March *et al.* (1967)). Tuy nhiên, con đường đơn giản hơn là tính hàm Green nhiệt độ tần số ảo tương ứng, sau đó bằng cách thay $i\omega_n \to \omega + i\delta$ với $\delta \to 0_+$ ta sẽ nhận được hàm Green trễ. Dưới đây ta sẽ chứng minh định đề này.

Hàm Green trễ được định nghĩa dưới dạng tổng quát như sau:

$$G^{(R)}(p, t-t') = -i\theta(t-t')\left\langle C_p(t)\, C_p^+(t') + C_p^+(t')\, C_p(t)\right\rangle. \qquad (3.63)$$

Ở đây, ta dùng ký hiệu G (mà không $\mathcal{G}$) vì hàm Green trễ là hàm của thời gian thực t, dù rằng trung bình $\langle\ldots\rangle$ trong (3.63) vẫn là trung bình nhiệt

động như trong (3.52). Các toán tử Heisenberg trong (3.63) phụ thuộc vào thời gian thực:

$$C_p(t) = e^{i\mathcal{K}t}\, C_p\, e^{-i\mathcal{K}t}\,. \tag{3.64}$$

Vì hàm Green trễ chỉ tác dụng khi $t > t'$, nên nó có tính nhân quả. Và, bởi lẽ nhân quả là tính chất cố hữu của mọi quá trình thực tiễn, hàm Green trễ có ý nghĩa thực tiễn rất lớn.

Là hàm của thời gian thực, hàm $G^{(R)}(p,\, t - t')$ biến đổi Fourier theo quy tắc thông thường:

$$G^{(R)}(p.\, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega(t-t')} G^{(R)}(p,\, t - t')\,. \tag{3.65}$$

Với các electron không tương tác, khi $\mathcal{K} = \mathcal{K}_0$ (3.58), theo (3.60) và (3.64), ta có

$$C_p(t) = e^{-i\xi_p t}\, C_p\,. \tag{3.66}$$

Thay (3.66) vào (3.63) ta được hàm Green trễ của electron không tương tác:

$$\begin{aligned} G_0^{(R)}(p,\, t - t') &= -i\theta(t - t')\, e^{-i\xi_p(t-t')} \left(C_p C_p^+ + C_p^+ C_p \right) \\ &= -i\theta(t - t') \exp\left[-i\xi_p(t - t')\right]. \end{aligned} \tag{3.67}$$

Thay (3.67) vào (3.65) ta nhận được dạng phụ thuộc tần số của hàm Green trễ electron tự do:

$$G_0^{(R)}(p,\, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_p + i\,\delta}\,. \tag{3.68}$$

Lưu ý rằng, ở đây tần số ω trùng với năng lượng E của hạt ($\hbar = 1$). So sánh (3.68) với hàm (3.36) trong trường hợp nhiệt độ không, ta thấy ở (3.36) bên cạnh δ có nhân tử $\text{sgn}(\xi_p)$, ngụ ý δ đổi dấu ở bề mặt Fermi, còn ở (3.68) ta chỉ đơn giản có $\delta \to 0_+$.

Bây giờ ta sẽ chứng minh rằng, hàm trễ $G^{(R)}(\omega)$ có thể nhận được từ hàm Matsubara $\mathcal{G}(i\,\omega_n)$ tương ứng. Trong các định nghĩa (3.52) hay (3.63) trung bình thực chất là lấy theo tập các trạng thái riêng chính xác của $\mathcal{K}$. Tất nhiên, ta chưa biết và cũng không thể biết các trạng thái này. Nhưng, dù sao, ít ra là về nguyên tắc, chúng tồn tại. Giả sử:

$$\mathcal{K}\, |\, n\rangle = E_n\, |\, n\rangle\,.$$

Khi đó, $\mathrm{Tr}(\ldots) = \sum_n \langle n| \ldots |n\rangle$ và hàm trễ (3.63) viết được dưới dạng

$$\begin{aligned} G^R(t-t') &= -i\theta(t-t')\, Z^{-1} \sum_n \langle n|\, e^{-\beta\mathcal{K}} \big[C(t)\, C^+(t') + \\ &\qquad + C^+(t')\, C(t) \big] |n\rangle \\ &= -i\theta(t-t')\, Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \big[\langle n|\, C(t)\,|m\rangle \\ &\qquad \langle m|\, C^+(t')\,|n\rangle + \langle n|\, C^+(t')\,|m\rangle \langle m|\, C(t)\,|n\rangle \big] . \end{aligned}$$

Ở đây và trong toàn bộ phần chứng minh này ta bỏ biến p trong các hàm Green cho gọn. Bốn yếu tố ma trận trong ngoặc vuông có thể đánh giá đơn giản, chẳng hạn:

$$\begin{aligned} \langle n|\, C(t)\,|m\rangle &= \langle n|\, e^{i\mathcal{K}t}\, C\, e^{-i\mathcal{K}t}\,|m\rangle \\ &= \langle n|\, C\,|m\rangle\; e^{i(E_n - E_m)t} . \end{aligned}$$

Với các yếu tố ma trận như vậy hàm $G^{(R)}(t-t')$ chuyển thành dạng:

$$\begin{aligned} G^{(R)}(t-t') &= -i\theta(t-t')\, Z^{-1} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} \Big[e^{i(E_n - E_m)(t-t')} \\ &\qquad |\langle n|\, C\,|m\rangle|^2 + e^{-i(E_n - E_m)(t-t')}\, |\langle m|\, C\,|n\rangle|^2 \Big] . \end{aligned}$$

Bằng cách đánh đổi hai chỉ số hình thức, $m \rightleftarrows n$, ở số hạng thứ hai trong ngoặc vuông, số hạng này sẽ trở nên trùng với số hạng đầu. Ta ghép hai số hạng với nhau với chú ý là khi đánh đổi như vậy nhân tử $e^{-\beta E_n}$ ứng với số hạng thứ hai chuyển thành $e^{-\beta E_m}$. Kết quả cho:

$$\begin{aligned} G^{(R)}(t-t') &= -i\theta(t-t')\, Z^{-1} \sum_{m,n} |\langle n|\, C\,|m\rangle|^2 \\ &\qquad \big[e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m} \big] \exp\{ i(t-t')(E_n - E_m) \} . \qquad (3.69) \end{aligned}$$

Đây là dạng phụ thuộc thời gian của hàm trễ, biểu diễn qua hàm riêng và trị riêng của $\mathcal{K}$. Đặt biểu thức này vào (3.65) ta nhận được hàm Green trễ phụ

thuộc tần số (năng lượng):

$$G^{(R)}(\omega) = -i\int_0^{\infty} e^{it(\omega+i\delta)}\, dt\, Z^{-1}\sum_{m,n} |\langle n|\,C\,|\,m\rangle|^2$$

$$\left[e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}\right] \exp\{i\ (E_n - E_m)\ t\}$$

$$= Z^{-1}\sum_{m,n} |\langle n|\,C\,|\,m\rangle|^2 \frac{e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}}{\omega + E_n - E_m + i\delta} \quad ;\ \delta \to 0_+ \qquad (3.70)$$

Ở đây, như thường làm (xem B3.2), số hạng $i\,\delta$ được bổ sung vào để bảo đảm sự hội tụ của tích phân ở t lớn.

Chuyển sang xét hàm Green Matsubara tương ứng. Theo định nghĩa (3.55), với $\tau > 0$, ta có:

$$\mathcal{G}(\tau) = -Z^{-1}\sum_{m,n} \langle n|\, e^{-\beta\mathcal{K}} C(\tau)\,|\,m\rangle\, \langle m|\; C^+\,|\,n\rangle$$

$$= -Z^{-1}\sum_{m,n} e^{-\beta E_n}\, \langle n|\, e^{\tau\mathcal{K}} C\, e^{-\tau\mathcal{K}}\,|\,m\rangle\, \langle m|\; C^+\,|\,n\rangle$$

$$= -Z^{-1}\sum_{m,n} |\langle n|\,C\,|\,m\rangle|^2\, e^{-\beta E_n}\, e^{\tau(E_n - E_m)}\,. \qquad (3.71)$$

Thực hiện biến đổi Fourier theo (3.65), từ (3.71) ta nhận được hàm Green Matsubara phụ thuộc tần số :

$$\mathcal{G}(i\omega_n) = -Z^{-1}\sum_{m,n} |\langle n|\,C\,|\,m\rangle|^2\, e^{-\beta E_n} \int_0^{\beta} d\tau\, e^{i\omega\tau}.\, e^{\tau(E_n - E_m)}$$

$$= Z^{-1}\sum_{m,n} |\langle n|\,C\,|\,m\rangle|^2 \frac{e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}}{i\omega_n + E_n - E_m}\,. \qquad (3.72)$$

Để nhận được kết quả cuối cùng ở trên, chú ý là, khi thay cận tích phân, với electron ta có $\exp\,(i\omega_n\beta) = -1$.

Biểu thức (3.72) là hàm Green tần số Matsubara biểu diễn qua các hàm riêng và trị riêng của $\mathcal{K}$. So sánh (3.72) với (3.70) ta thấy, quả là hàm Green

trễ $G^{(R)}(\omega)$ có thể nhận được trực tiếp từ hàm Green Matsubara bằng cách đơn giản thay $i\omega_n \to \omega + i\delta$:

$$G^{(R)}(\omega) = \mathcal{G}(i\omega_n \to \omega + i\delta) \ . \tag{3.73}$$

Đây chính là định đề cần chứng minh về hệ thức giữa hàm Green trễ và hàm Green Matsubara.

Vì hàm Green sớm $G^{(A)}(\omega)$ bằng liên hợp phức của hàm Green trễ, nên từ (3.73) ta cũng có:

$$G^{(A)}(\omega) = \mathcal{G}(i\omega_n \to \omega - i\delta) \ .$$

Như vậy, bằng phép chuyển giản đơn (3.73), một khi biết hàm Green Matsubara ta dễ dàng nhận được hàm Green trễ tương ứng. Từ hàm Green trễ ta có thể tính tiếp các đại lượng, có thể đo trực tiếp bằng thực nghiệm. Ta xét một đại lượng quan trọng được định nghĩa qua hàm Green trễ, gọi là hàm phổ.

Hàm phổ (spectral function) hay hàm mật độ phổ (spectral density function) của electron được định nghĩa là:

$$A(p, \omega) = -2\mathrm{Im}\left\{G^{(R)}(p, \omega)\right\} \ . \tag{3.74}$$

Ở đây, cũng cần nói thêm rằng, độc giả có thể gặp các định nghĩa khác nhau về hàm phổ, nhưng sự khác nhau chỉ là ở hệ số phía trước (xem B3.3).

Đặt (3.70) vào (3.74), sử dụng đồng nhất thức (1.70), ta có

$$\begin{aligned} A(p, \omega) &= 2\pi Z^{-1} \sum_{n,m} |\langle n| C_p |m\rangle|^2 \left(e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}\right) . \\ &\quad \delta(\omega + E_n - E_m) \, . \end{aligned} \tag{3.75}$$

Hàm phổ (3.75) có các tính chất cơ bản sau:

(1) $A(p, \omega)$ luôn dương. Điều này dễ thấy vì tất cả các số hạng ở vế phải của (3.75) là dương. Đây là tính chất quan trọng và cần có vì $A(p, \omega)$ có ý nghĩa như một hàm xác suất.

(2) $A(p, \omega)$ thỏa mãn quy tắc tổng

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A(p, \omega) = 1. \tag{3.76}$$

Quy tắc này có thể chứng minh bằng lấy tích phân trực tiếp (3.75):

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A(p,\omega) &= Z^{-1} \sum_{n,m} |\langle n| C_p |m\rangle|^2 \left(e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}\right) \\
&= Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \left[\langle n| C_p |m\rangle \langle m| C_p^+ |n\rangle + \right. \\
&\qquad \left. \langle n| C_p^+ |m\rangle \langle m| C_p |n\rangle\right] \\
&= Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle n| C_p C_p^+ + C_p^+ C_p | n\rangle \\
&= Z^{-1} \mathrm{Tr}\{e^{-\beta \mathcal{K}}\} \equiv 1 .
\end{aligned}$$

Trong quá trình chứng minh trên, theo từng bước, ta đã: (i) tách biểu thức trong tổng thành hai số hạng, ở số hạng thứ hai ta đổi vị trí hai chỉ số hình thức n và m; (ii) sử dụng phản giao hoán $\left[C_p, C_p^+\right] = 1$.

(3) Đối với electron không tương tác, $\mathcal{K} = \mathcal{K}_0$, tương ứng với G_0^R (3.68), ta có:

$$A_0(p, \omega) = 2\pi\, \delta(\omega - \xi_p) \; . \tag{3.77}$$

Ý nghĩa của hệ thức này sẽ trở nên rõ ràng nếu ta lý giải $A_0(p, \omega)$ như phân bố xác suất để electron có động lượng (momentum) p và năng lượng $E = \omega$. Vì với electron tự do $E = \xi_p$, nên phân bố xác suất phải có dạng hàm delta.

(4) Biết hàm phổ, ta có thể tính số trung bình các electron ở trạng thái với động lượng p theo hệ thức:

$$n_p = \int \frac{dE}{2\pi} n_F(E)\, A(p, E) \; , \tag{3.78}$$

trong đó $n_F(E)$ là hàm Fermi. Để chứng minh hệ thức này, ta viết n_p trong

trung bình nhiệt động:

$$\begin{aligned} n_p &= Z^{-1} \sum_{m\,n} \langle m | e^{-\beta K} C_p^+ | n \rangle \langle n | C_p | m \rangle \\ &= Z^{-1} \sum_{m,n} e^{-\beta E_m} |\langle n | C_p | m \rangle|^2 \,. \end{aligned}$$

Trở lại biểu thức $A(p, E)$ (3.75), bằng tính trực tiếp ta thấy

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \frac{1}{e^{\beta E} + 1} A(p, E) &= Z^{-1} \sum_{m\,n} e^{-\beta E_m} |\langle n | C_p | m \rangle|^2 \\ &= n_p \,. \end{aligned}$$

Vì $\left(e^{\beta E} + 1\right)^{-1} = n_F(E)$, nên đẳng thức trên chính là hệ thức cần chứng minh (3.78). Ý nghĩa của hệ thức này là, số trung bình các hạt ở trạng thái p bằng tổng của $n_F(E)$ với trọng khối $A(p, E)$ theo mọi năng lượng có thể. Ở đây, một lần nữa ta thấy $A(p, E)$ có ý nghĩa như xác suất để hạt với năng lượng E có động lượng p. Trong trường hợp riêng của electron không tương tác, khi $A = A_0(p, E) = 2\pi\delta(E - \xi_p)$ (3.77), vế phải của (3.78) cho ta biểu thức quen thuộc của toán tử số hạt trung bình

$$n_F(\xi_p) = \langle C_p^+ C_p \rangle = \left(e^{\beta \xi_p} + 1\right)^{-1} .$$

3.4 Hàm Green phonon

Vì trình tự cũng như mọi biến đổi, chứng minh ở tiết này là hoàn toàn tương tự với tiết trên, chỉ khác nhau ở những chỗ có liên quan đến tính thống kê của hạt (hệ thức giao hoán, toán tử mật độ hạt...) do electron là fermion còn phonon là boson, nên chúng ta bỏ qua các dẫn dắt trung gian, chỉ đề cập tóm tắt các kết quả chính. Các chi tiết tính toán có thể tham khảo trong các cuốn sách của Abrikosov và đồng tác giả (Abrikosov *et al.* 1963) hay của Mahan (Mahan 2000).

3.4.1 Trường hợp nhiệt độ không

Hàm Green phonon nhiệt độ không được định nghĩa là:

$$D(q, \lambda; t - t') = -i \langle | T B_{q\lambda}(t) B_{-q\lambda}(t') | \rangle \,, \tag{3.79}$$

với

$$B_{q\lambda} = b_{q\lambda} + b^+_{-q\lambda},$$

trong đó $b_{q\lambda}$ $\left(b^+_{-q\lambda}\right)$ là toán tử hủy (sinh) trong biểu thức khai triển của toán tử dịch chuyển nút mạng:

$$\delta \mathbf{R}_i(t) = i \sum \left(\frac{\hbar}{2MN\omega_{k\lambda}}\right)^{1/2} \boldsymbol{\xi}_{k\lambda} \left(b_{k\lambda} e^{-i\omega_{k\lambda} t} + b^+_{-k\lambda} e^{i\omega_{k\lambda} t}\right) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i^{(0)}}$$

(M: khối lượng của nguyên tử nút mạng, N: số nguyên tử ; $\boldsymbol{\xi}_{k\lambda}$: vectơ phân cực ; λ: chỉ số phân cực của phonon).

Với một phân cực xác định, hàm (3.79) biểu diễn được qua S-matrận dưới dạng

$$D(q, t - t') = -i \frac{{}_0\langle|\, T \hat{B}_q(t)\, \hat{B}_{-q}(t')\, S(\infty, -\infty)\, |\rangle_0}{{}_0\langle|\, S(\infty, -\infty)\, |\rangle_0}. \tag{3.80}$$

Nếu không có nhiễu loạn, thì tương tự như ví dụ 1 trong 3.2.2, chú ý thêm là, với phonon ${}_0\langle|\, b_q b_q^+ \,|\rangle_0 = 1$, ${}_0\langle|\, b_q^+ b_q \,|\rangle_0 = 0$, ta có hàm Green phonon tự do:

$$\begin{aligned} D(q, \omega) &= \frac{1}{\omega - \omega_q + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega_q - i\delta} \\ &\equiv \frac{2\omega_q}{\omega^2 - \omega_q^2 + i\delta}. \end{aligned} \tag{3.81}$$

3.4.2 Trường hợp nhiệt độ hữu hạn

Hàm Green phonon nhiệt độ hữu hạn được định nghĩa là:

$$\mathcal{D}(q, \tau - \tau') = -\langle T\, B_q(\tau)\, B_{-q}(\tau')\rangle \quad ; \; -\beta \le \tau \le \beta \tag{3.82}$$

với

$$B_q(\tau) = e^{\tau \mathcal{H}} \left(b_q + b^+_{-q}\right) e^{-\tau \mathcal{H}}. \tag{3.83}$$

Vì phonon không có thế hóa học (số hạt không xác định), nên sự phụ thuộc τ của các toán tử chỉ liên quan với Hamiltonian $\mathcal{H}$. Cũng như với hàm Green electron, vế phải của (3.82) chỉ phụ thuộc vào $(\tau - \tau')$.

Khác nhau chủ yếu giữa hàm electron $\mathcal{G}$ và hàm phonon $\mathcal{D}$ là ở chỗ, hàm phonon $\mathcal{D}(\tau)$ có tính chất của các hàm boson (3.47):

$$\mathcal{D}(q, \tau) = \mathcal{D}(q, \tau + \beta) \quad ; \; -\beta < \tau < 0 \,, \tag{3.84}$$

và do đó, nó biến đổi Fourier theo quy tắc (3.49).

$$\mathcal{D}(q, i\,\omega_n) \;=\; \int_0^\infty d\tau\, e^{i\,\omega_n \tau}\, \mathcal{D}(q, \tau) \,, \tag{3.85}$$

$$\mathcal{D}(q, \tau) \;=\; \frac{1}{\beta} \sum e^{-i\,\omega_n \tau}\, \mathcal{D}(q, i\,\omega_n) \,, \tag{3.86}$$

trong đó tần số ω_n chỉ nhận các giá trị bằng một số chẵn lần của π/β.

Để ý là, sự khác nhau giữa các đại lượng đối với electron (fermion) và phonon (boson) thường chỉ là khác về dấu (chẳng hạn giữa (3.47) và (3.50) hay giữa $n_F(\xi_p)$ và $n_B(\omega_q)$). Nguồn gốc của sự khác nhau này là, trong khi các toán tử fermion tuân theo hệ thức phản giao hoán thì các toán tử boson tuân theo hệ thức giao hoán.

Hàm Green nhiệt độ đối với hệ phonon tự do, khi $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 = \sum \omega_q\, b_q^+\, b_q$, dễ dàng nhận được bằng thay trực tiếp vào (3.82) các toán tử (3.83) với $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0$:

$$\begin{aligned} B_q(\tau) \;&=\; e^{\tau \mathcal{H}_0}\, b_q\, e^{-\tau \mathcal{H}_0} + e^{\tau \mathcal{H}_0}\, b_{-q}^+\, e^{-\tau \mathcal{H}_0} \\ &=\; e^{-\tau \omega_q}\, b_q + e^{\tau \omega_q}\, b_{-q}^+ \end{aligned}$$

(ở đây ta đã sử dụng (3.60)), đồng thời chú ý đến các hệ thức đối với giá trị trung bình nhiệt động của toán tử số boson $N_q = \langle b_q^+\, b_q \rangle \equiv n_B(\omega_q)$; $\langle b_q\, b_q^+ \rangle = N_q + 1$. Kết quả cho:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_0(q, \tau) \;&=\; -\,\theta(\tau)\left[(N_q + 1)\, e^{-\tau \omega_q} + N_q\, e^{\tau \omega_q}\right] \\ &=\; -\,\theta(-\tau)\left[N_q\, e^{-\tau \omega_q} + (N_q + 1)\, e^{\tau \omega_q}\right]. \end{aligned} \tag{3.87}$$

Đây chính là dạng phụ thuộc thời gian của hàm Green phonon tự do ở nhiệt độ hữu hạn. Thay biểu thức này vào (3.85) ta được hàm Green phụ thuộc

tần số tương ứng:

$$\mathcal{D}_0(q, i\omega_n) = \frac{2\omega_q}{(i\omega_n)^2 - \omega_q^2} = -\frac{2\omega_q}{\omega_n^2 + \omega_q^2}. \tag{3.88}$$

Rõ ràng là hàm này luôn âm và nó có dạng gần giống với hàm Green nhiệt độ không tương ứng (3.81).

3.4.3 Hàm Green phonon trễ

Hàm Green phonon trễ được định nghĩa là

$$D^{(R)}(q, t-t') = -i\theta(t-t')\langle B_q(t)B_{-q}(t') - B_{-q}(t')B_q(t)\rangle. \tag{3.89}$$

Giữa hàm trễ $D^{(R)}$ (3.89) và hàm Matsubara (3.82) đối với phonon cũng có hệ thức tương tự như (3.73):

$$D^{(R)}(\omega) = \mathcal{D}(i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta).$$

Và cuối cùng, hàm phổ phonon $P(q, \omega)$ cũng được xác định tương tự như (3.74):

$$P(q, \omega) = -2\,\mathrm{Im}\{D^{(R)}(q, \omega)\}. \tag{3.90}$$

Hàm này thỏa mãn "quy tắc tổng":

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} n_B(\omega) P(q, \omega) = 2N_q + 1. \tag{3.91}$$

Với phonon đại lượng $n_B(\omega)P(q, \omega)$ luôn dương và có thể hiểu như xác suất phụ thuộc nhiệt độ để có các phonon với q và ω. Đối với các phonon không tương tác, từ (3.88) và (3.90) ta có:

$$P_0(q, \omega) = 2\pi[\delta(\omega - \omega_q) - \delta(\omega + \omega_q)]. \tag{3.92}$$

Thảo luận bổ sung và bài tập

B3.1 Nói chung thuật ngữ "hàm Green" trong lý thuyết trường có ý nghĩa rộng hơn trong lý thuyết các phương trình vi phân tuyến tính. Trong lý thuyết trường dù rằng hàm Green vẫn thỏa mãn phương trình với vế phải là hàm delta, nhưng các phương trình này nói chung là phi tuyến. Các định nghĩa hàm Green trong chương 3 là tổng quát cho các hệ nhiều hạt có tương tác. Trong trường hợp riêng của hệ hạt không tương tác, khi phương trình trường trở nên tuyến tính, ta có thể viết hàm Green dưới dạng đơn giản như trong chương 2.

B3.2 Trong cuốn sách này ta thường gặp các tích phân dạng

$$\int_0^{\infty} e^{ist}\, dt$$

Để tính tích phân dạng này ta xem nó như giới hạn

$$\lim_{\delta \to 0_+} \int_0^{\infty} e^{ist-\delta t}\, dt = i \lim_{\delta \to 0_+} \frac{1}{s + i\delta} \, .$$

Số hạng $i\delta$ ở mẫu số mô tả phương pháp bao cực $s = 0$ khi tính tích phân. Cụ thể là, sử dụng tích phân trị chính

$$\int F(s)\, \frac{ds}{s + i\delta} = P \int \frac{F(s)}{s}\, ds - i\pi\, F(0) \, ,$$

ta có thể viết tiếp

$$\frac{1}{s + i\delta} = P\left(\frac{1}{s}\right) - i\pi\, \delta(s) \, .$$

Đây chính là đẳng thức (1.70).

B3.3 Trong cuốn sách của March và đồng tác giả (March *et al.* 1967) hàm phổ electron được định-nghĩa là $A(p, \omega) = G^{(R)}(p, \omega) - G^{(A)}(p, \omega)$, khác với (3.74) bởi nhân tử $(-i)$. Còn trong cuốn sách của Rickayzen (Richkayzen 1980): $G^{(R)}(\omega) - G^{(A)}(\omega) = 2\pi\, iA(\omega)$. Ngoài (3.76) và (3.78), hàm phổ còn thỏa mãn một số quy tắc tổng khác (xem Martin and Schwinger 1959).

B3.4 Hãy kiểm tra lại hệ thức sau đây trong dẫn giải (3.13):

$$\frac{1}{3!}\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \int_0^t dt_3\, T\left[V\left(t_1\right)\, V\left(t_2\right)\, V\left(t_3\right)\right]$$
$$= \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3\, V\left(t_1\right)\, V\left(t_2\right)\, V\left(t_3\right)\ .$$

B3.5 Chứng minh rằng công thức Feynman

$$e^{A+B} = e^A\, e^B \,.\, e^{-(1/2)[A,\, B]}$$

chỉ đúng nếu $[A,\ B]$ giao hoán với cả A lẫn B.

B3.6 Chứng minh hệ thức sau

$$G^{(R)}\left(p,\, t\right) = -\, i\,\theta\left(t\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, A\left(p,\, \omega\right)\, e^{-\,i\omega\, t}.$$

Chương 4

Hàm Green và lý thuyết nhiễu loạn

Chương này dành để trình bày lý thuyết nhiễu loạn trong hình thức luận hàm Green. Trong lý thuyết này, Hamiltonian toàn phần của hệ được viết dưới dạng $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$, trong đó $\mathcal{H}_0$ là phần có thể giải chính xác, thường gọi là Hamiltonian không nhiễu loạn, còn V là phần nhiễu loạn. Trong ngôn ngữ hàm Green việc tìm hàm riêng, trị riêng của Hamiltonian toàn phần $\mathcal{H}$ có thể thực hiện theo các bước sau:

(1) Tìm hàm Green G_0, tương ứng với $\mathcal{H}_0$.

(2) Biểu diễn hàm Green G của Hamiltonian toàn phần $\mathcal{H}$ qua G_0 và V.

(3) Từ hàm Green G nhận được, rút ra các thông tin về trị riêng, hàm riêng của $\mathcal{H}$.

Bước (1) phụ thuộc vào dạng cụ thể của $\mathcal{H}_0$. Thông thường $\mathcal{H}_0$ được chọn sao cho G_0 đã biết hoặc dễ dàng tìm được. Bước (3) đã trình bày chi tiết trong chương 2. Bước (2) có thể thực hiện bằng sử dụng gần đúng nhiễu loạn và là nội dung hai tiết đầu của chương này. Ta sẽ xét hai trường hợp: nhiễu loạn không phụ thuộc và có phụ thuộc thời gian. Để tiện sử dụng, các kết quả chính sẽ được viết đồng thời trong các biểu diễn khác nhau.

4.1 Nhiễu loạn không phụ thuộc thời gian

Xét trường hợp Hamiltonian của hệ $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$ không phụ thuộc thời gian, nghĩa là ta có bài toán trạng thái dừng. Thông thường $\mathcal{H}_0$ và V được chọn sao cho đóng góp của V là nhỏ hơn so với của $\mathcal{H}_0$. Nội dung của phương pháp nhiễu loạn là tìm bổ chính liên quan với V vào trị riêng và

hàm riêng của $\mathcal{H}_0$. Bổ chính này là một chuỗi vô hạn theo V, và trong thực tế, tính toán thường dừng lại chỉ ở vài số hạng đầu. Dưới đây, ta sẽ viết chuỗi nhiễu loạn bằng ngôn ngữ hàm Green.

Giả sử ta đã biết hàm Green G_0 của $\mathcal{H}_0$ (xem (2.88)) :

$$G_0(\eta) = (\eta - \mathcal{H}_0)^{-1}, \tag{4.1}$$

và phải tìm hàm Green của Hamiltonian toàn phần:

$$G(\eta) = (\eta - \mathcal{H})^{-1}. \tag{4.2}$$

Trong (4.2) thay $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$, ta có

$$\begin{aligned} G(\eta) &= (\eta - \mathcal{H}_0 - V)^{-1} \\ &= \{(\eta - \mathcal{H}_0)\left[1 - (\eta - \mathcal{H}_0)^{-1} V\right]\}^{-1} \\ &= [1 - G_0(\eta)\, V]^{-1}\, G_0(\eta) . \end{aligned}$$

Khai triển nhân tử $(1 - G_0 V)^{-1}$ thành chuỗi lũy thừa, ta có tiếp:

$$G(\eta) = G_0 + G_0 V G_0 + G_0 V G_0 V G_0 + \ldots \tag{4.3}$$

Đây chính là hệ thức cần tìm, trong đó G được biểu diễn dưới dạng một chuỗi vô hạn của $G_0 V$.

Ta viết lại (4.3) dưới dạng gọn và đẹp hơn:

$$G = G_0 + G_0 V \ (G_0 + G_0 V G_0 + \ldots) .$$

Vì chuỗi là vô hạn nên biểu thức trong ngoặc lại chính là G (4.3), nghĩa là:

$$G = G_0 + G_0 V G . \tag{4.4}$$

Ta cũng có thể viết (4.3) dưới dạng

$$\begin{aligned} G &= G_0 + (G_0 + G_0 V G_0 + \ldots)\, V G_0 \\ &= G_0 + G V G_0 . \end{aligned} \tag{4.5}$$

Hệ thức (4.4) hay (4.5) là các dạng viết gọn của (4.3). Đó là các phương trình kín xác định G theo G_0 và V.

Trong r-biểu diễn, chẳng hạn (4.4) có dạng:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta) = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta) + \int d\mathbf{r}_1 \, d\mathbf{r}_2 \, G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1; \eta) \, V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \, G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'; \eta) \,. \tag{4.6}$$

Nếu thế nhiễu loạn V có dạng đơn giản (thường gặp trong nhiều bài toán một hạt trong trường ngoài): $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \, V'(\mathbf{r}_1)$, thì (4.6) chuyển thành:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta) = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta) + \int d\mathbf{r}_1 \, G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1; \eta) \, V'(\mathbf{r}_1) \, G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'; \eta) \,. \tag{4.7}$$

Đây là một phương trình tích phân tuyến tính không đồng nhất của hàm Green G với nhân (kernel) là $G_0 V'$.

Còn, nếu làm việc trong **k** biểu diễn thì (4.4) có dạng:

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \eta) = G_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \eta) + \sum G_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1; \eta) \, V(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \, G(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}'; \eta) \,. \tag{4.8}$$

Biểu thức (4.8) là biến đổi Fourier của biểu thức tương ứng (4.6).

Trong lý thuyết nhiễu loạn không phụ thuộc thời gian, cùng với hàm Green, ta đưa vào một đại lượng bổ trợ quan trọng gọi là T-ma-trận, định nghĩa như sau:

$$T(\eta) = V \, G(\eta) \, [\eta - \mathcal{H}_0] \,. \tag{4.9}$$

Tất nhiên, nếu η trùng với trị riêng gián đoạn E_n của $\mathcal{H}$ thì $G(\eta)$ có cực đơn giản, và vì vậy $T(\eta)$ cũng có cực, trừ trường hợp, khi trị riêng E_n và hàm riêng tương ứng $|\psi_n\rangle$ của $\mathcal{H}$ thỏa mãn cả phương trình với $\mathcal{H}_0$: $\mathcal{H}_0 \, |\psi_n\rangle = E_n \, |\psi_n\rangle$. Trong trường hợp đó, cực của $G(\eta)$ và không điểm của $(\eta - \mathcal{H}_0)$ tại $\eta = E_n$ có thể khử nhau và hàm $T(\eta)$ vẫn là giải tích. Còn, nếu η trùng với E thuộc phổ liên tục của $\mathcal{H}$, thì tương ứng với $G^{\pm}(E)$, ta định nghĩa

$$T^{\pm}(E) = V \, G^{\pm}(E) \, (E - \mathcal{H}_0) \,. \tag{4.10}$$

Nói chung, tính chất giải tích của $T(\eta)$ là giống như của $G(\eta)$. Và, tương tự như (4.3) (4.8), hàm $T(\eta)$ có thể biểu diễn qua G_0 và V. Thật vậy, nếu trong (4.9) thay G bằng biểu thức (4.3) và $(\eta - \mathcal{H}_0) = G_0^{-1}$, ta được:

$$\begin{aligned} T(\eta) &= V + V\,G_0(\eta)\,V + V\,G_0(\eta)\,V\,G_0(\eta)\,V + \dots \\ &= V + V\,(G_0 + G_0 V\,G_0 + \dots)\;V\,. \end{aligned}$$

Vì biểu thức trong ngoặc chính là G, nên

$$T(\eta) = V + V\,G(\eta)\;V. \qquad (4.11)$$

Bằng các cách ghép nhóm khác, tương tự như khi dẫn ra (4.4), (4.5), ta dễ dàng nhận được các hệ thức tương đương:

$$T(\eta) = V + V\,G_0(\eta)\;T(\eta)\,, \qquad (4.12)$$

$$T(\eta) = V + T(\eta)\;G_0(\eta)\;V. \qquad (4.13)$$

Hơn nữa, dễ thấy là hệ thức cơ bản (4.3) cũng có thể viết lại qua $T(\eta)$:

$$G(\eta) = G_0(\eta) + G_0(\eta)\;T(\eta)\;G_0(\eta)\,. \qquad (4.14)$$

Như vậy, một khi biết $T(\eta)$ ta có thể tính $G(\eta)$ và ngược lại. Các hệ thức toán tử trên tất nhiên có thể viết rõ ra trong **r** biểu diễn hay **k**-biểu-diễn như đã làm với hàm G ở (4.6)- (4.8). Chẳng hạn, trong **k**-biểu-diễn hệ thức (4.12) có dạng:

$$T(\mathbf{k},\mathbf{k}';\,\eta) = V(\mathbf{k},\,\mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} V(\mathbf{k},\,\mathbf{k}_1)\,G_0(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2;\,\eta)\;T(\mathbf{k}_2,\mathbf{k}';\,\eta)\,, \qquad (4.15)$$

trong đó

$$\begin{aligned} V(\mathbf{k},\mathbf{k}') &= \langle\mathbf{k}|\;V\;|\mathbf{k}'\rangle \\ &= \frac{1}{\Omega}\int d\mathbf{r}\,d\mathbf{r}'\,V(\mathbf{r},\mathbf{r}')\,\exp\left(-\,i\,\mathbf{k}\,\mathbf{r} + i\,\mathbf{k}'\,\mathbf{r}'\right); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G_0(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \eta) &= \langle \mathbf{k}_1 | G_0(\eta) | \mathbf{k}_2 \rangle \\ &= \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 G_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \eta) \exp(-i\mathbf{k}_1\mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2\mathbf{r}_2); \\ T(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \eta) &= \langle \mathbf{k} | T(\eta) | \mathbf{k}' \rangle \\ &= \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' T(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r} + i\mathbf{k}'\mathbf{r}'). \end{aligned}$$

Trong trường hợp riêng, khi nhiễu loạn V có dạng $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V'(\mathbf{r})$, thì

$$V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{r}\, V'(\mathbf{r})\, e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} \equiv \frac{1}{\Omega} V'(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \tag{4.16}$$

Ở đây, $V'(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \equiv V'(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} V'(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}$ là biến đổi Fourier của $V'(\mathbf{r})$.

Nếu $G_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ là hàm chỉ của $(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ thì ta có:

$$G_0(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \eta) = \delta_{k_1 k_2} G_0(\mathbf{k}_1; \eta), \tag{4.17}$$

trong đó $G_0(\mathbf{k}_1; \eta)$ là biến đổi Fourier của $G_0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; \eta)$ đối với biến $\boldsymbol{\rho} = (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$.

Trong trường hợp, khi cả hai điều kiện (4.16) và (4.17) đều được thỏa mãn, hệ thức (4.15) trở thành:

$$\begin{aligned} T'(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \eta) &= V'(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi)^D} V'(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \\ &\quad G_0(\mathbf{k}_1; \eta) T'(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'; \eta). \end{aligned} \tag{4.18}$$

Ở đây, ta đặt $T' = \Omega T$; D là số chiều.

Như đã giới thiệu ở trên, nói chung tính chất giải tích của T-ma trận là tương tự như của hàm Green G. Và như vậy, như chỉ ra ở chương 2, biết G hoặc T ta có thể xác định (i) trị riêng gián đoạn và hàm riêng tương ứng của $\mathcal{H}$, và (ii) mật độ trạng thái trong miền phổ liên tục của $\mathcal{H}$. Bây giờ, ta thảo luận thêm vấn đề: làm thế nào để xác định các trạng thái riêng ứng với miền phổ liên tục của $\mathcal{H}$.

Phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian $(E - \mathcal{H})|\psi\rangle = 0$ có thể viết dưới dạng

$$(E - \mathcal{H}_0)|\psi\rangle = V|\psi\rangle . \quad (4.19)$$

Ta xem xét trường hợp E thuộc phổ liên tục của $\mathcal{H}$. Phương trình (4.19) có thể xem là một phương trình không đồng nhất. Phương trình đồng nhất tương ứng là $(E - \mathcal{H}_0)|\phi\rangle = 0$. Ở đây ta giả thiết E cũng thuộc phổ liên tục của $\mathcal{H}_0$. Khi đó, theo (2.25) lời giải tổng quát của (4.19) có dạng:

$$|\psi^{\pm}\rangle = |\phi\rangle + G_0^{\pm}(E)\, V\, |\psi^{\pm}\rangle . \quad (4.20)$$

Ở đây, dấu $\pm$ ở $|\psi\rangle$ là tương ứng với cùng dấu ở $G_0^{\pm}$ (ta đang làm việc với phổ liên tục). Trong r-biểu diễn lời giải (4.20) có dạng

$$\psi^{\pm}(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}_1\, d\mathbf{r}_2 G_0^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1;\, E)\, V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\, \psi^{\pm}(\mathbf{r}_2) \ . \quad (4.21)$$

Đây là một phương trình tích phân tuyến tính không đồng nhất cho phép xác định trạng thái riêng ứng với năng lượng E thuộc phổ liên tục của $\mathcal{H}$, một khi đã biết hàm riêng $\phi(\mathbf{r})$ và hàm $G_0^{\pm}(E)$ của Hamiltonian không nhiễu loạn tương ứng.

Trong trường hợp riêng với $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\, V'(\mathbf{r}_1)$, thì (4.21) chuyển thành

$$\psi^{\pm}(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}_1 G_0^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1;\, E)\, V'(\mathbf{r}_1)\, \psi^{\pm}(\mathbf{r}_1) . \quad (4.22)$$

Phương trình (4.21) hay (4.22) thường được gọi là phương trình Lippman-Schwinger. Xin nhắc lại rằng, $\mathcal{H}_0$ và V thường được chọn sao cho $\mathcal{H}_0$ và $\mathcal{H}$ có phổ liên tục trùng nhau. Trong trường hợp ngược lại, E không thuộc phổ của $\mathcal{H}_0$ thì tương ứng $\phi(\mathbf{r}) = 0$ và $G_0^{\pm}(E)$ được thay bằng $G_0(E)$ (giải tích tại $\eta = E$).

Hệ thức quan trọng (4.20) có thể viết dưới dạng khác, biểu diễn qua $T^{\pm}$ hay $G^{\pm}$. Thật vậy, khai triển (4.20), ta có:

$$\begin{aligned} |\psi^{\pm}\rangle &= |\phi\rangle + G_0^{\pm} V \left[|\phi\rangle + G_0^{\pm}(E)\, V\, (|\phi\rangle + \ldots)\right] \\ &= |\phi\rangle + G_0^{\pm} \left[V + V G_0^{\pm}(E)\, V + \ldots\right] |\phi\rangle \ . \end{aligned}$$

Phần trong ngoặc, theo (4.11), chính là $T^{\pm}$. Thành ra, ta có biểu thức biểu diễn $|\psi^{\pm}\rangle$ qua $T^{\pm}$:

$$\left|\psi^{\pm}\right\rangle = |\phi\rangle + G_0^{\pm} T^{\pm} |\phi\rangle \,. \tag{4.23}$$

Để biểu diễn $|\psi^{\pm}\rangle$ qua $G^{\pm}$, để ý là, nếu nhân trái hai vế của (4.3) với V thì ta được:

$$V\, G = T\, G_0 \,. \tag{4.24}$$

còn nếu nhân phải, thì

$$G\, V = G_0\, T \,. \tag{4.25}$$

Thay (4.25) vào (4.23), ta được:

$$\left|\psi^{\pm}\right\rangle = |\phi\rangle + G^{\pm}\, V\, |\phi\rangle \,. \tag{4.26}$$

Các hệ thức (4.20), (4.23) và (4.26) là tương đương. Mỗi hệ thức này là một phương trình kín để xác định hàm riêng trong phổ liên tục của $\mathcal{H}$. Bằng kết hợp các hệ thức trên ta có thể rút ra các hệ thức bổ ích khác. Chẳng hạn, so sánh (4.20) và (4.23), ta thấy:

$$T^{\pm}\, |\phi\rangle = V \left|\psi^{\pm}\right\rangle , \tag{4.27}$$

ở đây, $|\psi^{\pm}\rangle$ liên hệ trực tiếp với $T^{\pm}$-matrận.

Cuối cùng, cần nêu thêm rằng, dường như hàm Green G và T-matrận là hai đại lượng tương đương, nhưng thực ra chúng khác nhau (xem định nghĩa 4.9). Hàm T có vai trò quan trọng trong lý thuyết tán xạ, trong khi hàm G là hạt nhân của các lý thuyết dẫn truyền.

4.2 Bài toán minh họa

4.2.1 Lý thuyết tán xạ (trường hợp $E > 0$)

Xét bài toán một hạt tự do tán xạ bởi một thế dạng delta với Hamiltonian $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$, trong đó

$$\mathcal{H}_0 = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2, \tag{4.28}$$

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \, V(\mathbf{r}) \; . \tag{4.29}$$

Thế $V(\mathbf{r})$ được giả thiết là dương và giảm đủ nhanh khi $r \to \infty$. Điều mà ta quan tâm trước tiên là dáng điệu hàm sóng của hạt $\psi(\mathbf{r})$ ở khoảng cách lớn sau tán xạ.

Trong bài toán khảo sát, phổ liên tục của $\mathcal{H}$ và $\mathcal{H}_0$ trùng nhau và chạy từ 0 đến $+\infty$. Tất nhiên, $\mathcal{H}$ có thể có phổ gián đoạn với năng lượng riêng âm nếu ở đâu đó $V(\mathbf{r})$ là âm. Nhưng, ở đây trước hết ta chỉ quan tâm đến trường hợp phổ liên tục. Khi đó, nội dung vật lý của bài toán là: một hạt tới với năng lượng $\hbar^2 k^2/2m$, mô tả bằng hàm sóng không nhiễu loạn $\exp(i\mathbf{kr})/\sqrt{\Omega}$ (xem Ví dụ 2.1.3), bị tán xạ bởi thế dương (4.29); do tán xạ hàm sóng của hạt bị thay đổi, ta cần tìm dạng tiệm cận của hàm này, $\psi(r)$ khi $r \to \infty$.

Bài toán có thể giải bằng áp dụng các kết quả trong tiết trước của lý thuyết nhiễu loạn không phụ thuộc thời gian. Thay hai nhân tử cuối trong (4.21) bằng (4.27) ta có

$$\begin{aligned}\psi^{\pm}(\mathbf{r}) \;&=\; \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{kr}} + \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 G_0^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1; E) \\ &\qquad T^{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\, e^{i\mathbf{kr}_2} \; .\end{aligned}$$

Sử dụng hàm $G_0^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1; E)$ (2.103), viết lại hệ thức trên:

$$\begin{aligned}\sqrt{\Omega}\psi^{\pm}(\mathbf{r}) \;&=\; e^{i\mathbf{kr}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{\exp(\pm\, ik\,|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} \\ &\qquad T^{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\, e^{i\mathbf{kr}_2} \; .\end{aligned}$$

Ta sẽ chỉ quan tâm đến dạng tiệm cận của $\psi^{\pm}$ khi $r \to \infty$. Trong giới hạn này, ta có thể bỏ qua $\mathbf{r}_1$ bên cạnh $\mathbf{r}$ ở mẫu số, đồng thời viết gần đúng số mũ ở tử số dưới dạng

$$k\,|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1| \approx kr - kr_1 \cos\theta = kr - \mathbf{k}_s \mathbf{r}_1$$

với $\mathbf{k}_s$ là hình chiếu của $\mathbf{k}$ lên $\mathbf{r}_1$. Trong gần đúng này,

$$\sqrt{\Omega}\,\psi^{\pm}(\mathbf{r}) \longrightarrow e^{i\mathbf{kr}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{1}{r}\,e^{\pm i k r}.$$
$$\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{\mp i\mathbf{k}_s\mathbf{r}_1}\langle\mathbf{r}_1|\,T^{\pm}(E)\,|\mathbf{r}_2\rangle\, e^{i\mathbf{kr}_2}$$
$$= e^{i\mathbf{kr}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{1}{r}\,e^{\pm i k r}\,\langle\pm\mathbf{k}_s|\,T'^{\pm}(E)\,|\mathbf{k}\rangle$$

Trong bước cuối của biến đổi ở trên, ta đã viết $e^{i\mathbf{kr}} = \sqrt{\Omega}\,\langle\mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle$ và sử dụng $\int d\mathbf{r}\,|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| = 1$ (chú ý: $T' = \Omega\, T$ như đã quy ước ở tiết trên).

Vì ta chỉ quan tâm đến lời giải tiệm cận khi $r \to \infty$, nên trong hai lời giải $(+/-)$ ở trên, ta chỉ lấy ψ^+ (trong ψ^- có thành phần sóng cầu tới, vô nghĩa về vật lý). Khi đó, bỏ qua dấu $(+)$ cho gọn, ta viết lại lời giải trên dưới dạng:

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow[r\,\to\,\infty]{} \text{const}\left[e^{i\mathbf{kr}} + f(\mathbf{k}_s,\mathbf{k})\,\frac{e^{ikr}}{r}\right], \tag{4.30}$$

trong đó biên độ tán xạ f là

$$f(\mathbf{k}_s,\mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left\langle\mathbf{k}_s\left|T'^{+}(E)\right|k\right\rangle. \tag{4.31}$$

Biết biên độ tán xạ (4.31), ta có thể xác định dạng tiệm cận của hàm sóng (4.30). Hơn nữa, theo định nghĩa (xem, chẳng hạn, Landau and Lifshitz 1960), biên độ f còn cho biết tiết diện tán xạ vi phân:

$$d\sigma/d\Theta = |f|^2 = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\left\langle\mathbf{k}_s\left|T'^{+}(E)\right|k\right\rangle\right|^2. \tag{4.32}$$

Như vậy, tính biên độ f chính là nội dung chủ yếu của bài toán tán xạ.

Lưu ý thêm rằng, với thế nhiễu loạn (4.29) hàm T' thỏa mãn hệ thức (4.18). Khi đó, hàm f (4.31) cũng phải thỏa mãn hệ thức tương tự:

$$f(\mathbf{k}_s,\mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\Big[V(\mathbf{k}_s-\mathbf{k}) + \int\frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi)^3}\frac{V(\mathbf{k}_s-\mathbf{k}_1)}{E-\hbar^2k_1^2/2m+i\delta}\,f(\mathbf{k}_1,\mathbf{k})\Big]. \tag{4.33}$$

Ở đây, ta đã thay G_0 dưới dấu tích phân bằng biểu thức (3.33). Hệ thức (4.33) là hệ thức tổng quát, một phương trình kín xác định biên độ tán xạ f trong bài toán thế tán xạ dạng delta. Nếu trong hệ thức này chỉ giữ lại số hạng đầu bên vế phải thì ta được biểu thức gần đúng Born nổi tiếng:

$$f\left(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}\right) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} V\left(\mathbf{k}_s - \mathbf{k}\right) \ , \tag{4.34}$$

trong đó, chú ý rằng $V\left(\mathbf{k}_s - \mathbf{k}\right)$ là biến đổi Fourier của $V\left(\mathbf{r}\right)$.

Ta tìm hiểu thêm về quan hệ giữa biên độ f và tiết diện toàn phần σ. Theo định nghĩa : (tiết diện tán xạ vi phân) = (xác suất chuyển trong một đơn vị thời gian) x (số trạng thái cuối) / (góc khối toàn phần, 4π) / (dòng hạt tới $j = v/\Omega$):

$$\frac{d\sigma}{d\Theta} = \frac{\Omega}{4\pi\, v} \int dE_s \rho\left(E_s\right) W_{k_s k} \, , \tag{4.35}$$

(xem Landau and Lifshitz 1960). Nếu thay vào (4.35) $v = \hbar k/m$; $\rho\left(E\right)$ = mật độ trạng thái của electron tự do (2.105); $W_{k_s k}$ = xác suất theo quy tắc vàng Fermi (4.73), ta sẽ nhận lại chính xác hệ thức (4.31). Quan trọng là, hệ thức (4.35) cho tiết diện toàn phần:

$$\begin{aligned}
\sigma &= \int \left(d\sigma/d\Theta\right) d\Theta = \frac{\Omega}{v} \sum_{k_s} W_{k_s k} \\
&= \frac{\Omega}{v}\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k_s} \left|\langle k_s| T^+\left(E\right)|k\rangle\right|^2 . \delta\left(E_s - E\right) \\
&= \frac{2\pi\Omega}{\hbar v} \sum_{k_s} \langle k| T^-\left(E\right)|k_s\rangle \langle k_s| T^+\left(E\right)|k\rangle\, \delta\left(E_s - E\right) \\
&= \frac{2\pi}{\hbar v}\frac{\Omega\, i}{2\pi} \left[\langle k| T^+\left(E\right)|k\rangle - \langle k| T^-\left(E\right)|k\rangle\right] \\
&= -\frac{2\Omega}{\hbar v} \operatorname{Im}\left\{\langle k| T^+\left(E\right)|k\rangle\right\} .
\end{aligned}$$

Trong biến đổi ở trên ta đã sử dụng các hệ thức (4.35) và (4.74). So sánh biểu thức vừa nhận được của σ và hệ thức (4.32), suy ra

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im}\left\{f\left(k, k\right)\right\}. \tag{4.36}$$

Đây là một kết quả quan trọng, thường gọi là định lý quang học, cho mối liên hệ giữa tiết diện toàn phần và biên độ tán xạ về phía trước.

Hệ thức (4.36) một lần nữa cho thấy vai trò trung tâm của biên độ f trong bài toán tán xạ. Đối với miền năng lượng dương vừa khảo sát hàm f cho ta dạng tiệm cận của hàm sóng và tiết diện tán xạ. Đối với năng lượng âm, dáng điệu của hàm f cũng có ý nghĩa vật lý quan trọng. Vì hàm f liên quan trực tiếp với T-ma-trận, cực của f cũng là cực của T và do đó trùng với trị riêng gián đoạn của hệ. Dáng điệu của hàm f cũng thường không đơn điệu, có thể có các cực đại nhọn ở một số năng lượng dương. Các trạng thái tương ứng với các cực đại này gọi là trạng thái cộng hưởng.

Để minh hoạ cho nhận xét trên, ta xét một ví dụ đơn giản, nhưng quan trọng, đó là trường hợp thế hút Coulomb $V(r) = -e^2/r$, trong đó e là điện tích cơ bản. Hàm biên độ tán xạ tính được là (Landau and Lifshitz 1960):

$$f = \frac{-t\,\Gamma(1-it)}{\Gamma(1+it)} \frac{\exp\left[2it\,.\ln(\sin\theta/2)\right]}{2k\,.\sin^2\theta/2}, \qquad (4.37)$$

trong đó

$$\begin{aligned} k &= \sqrt{2mE/\hbar^2}\ ;\ \mathrm{Im}\{k\} \geq 0\ ; \\ t &= me^2/\hbar^2 k\ ; \end{aligned} \qquad (4.38)$$

θ là góc giữa $\mathbf{k}$ và $\mathbf{k}_s$.

Hàm f (4.37) có các cực tương ứng các giá trị nguyên, không dương của biến trong hàm $\Gamma(1-it)$, tức là khi $1 - it = -p$; $p = 0, 1, 2, \ldots$, hay

$$it = 1 + p = n; \quad n = 1, 2, \ldots \qquad (4.39)$$

Với t từ (4.38), sau khi biểu diễn k qua E, điều kiện (4.39) dẫn đến kết luận quen thuộc: hàm f có cực trùng với năng lượng gián đoạn của hệ:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}\ ;\ n = 1, 2, \ldots \qquad (4.40)$$

Lưu ý là, phổ gián đoạn (4.40) là hệ quả của tương tác hút $V < 0$. Nếu ngược lại, tương tác là đẩy thì hàm f vẫn có dạng như (4.37) chỉ thay (i) bằng $(-i)$. Khi đó, biến trong hàm Γ ở tử số không còn có thể là nguyên và không dương nữa, hàm f không có cực, nghĩa là hệ không có phổ gián đoạn.

4.2.2 Trạng thái liên kết trong các hố thế nông (trường hợp $E < 0$)

Ta vẫn xét bài toán tán xạ của một hạt tự do, nhưng bây giờ thế tán xạ có dạng

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} -V_0\,, & \text{nếu r thuộc miền } \Omega_0 \text{ nào đó}\,, \\ 0\,, & \text{nếu r không thuộc } \Omega_0\,, \end{cases} \tag{4.41}$$

trong đó V_0 là hằng số, dương và rất nhỏ ($V_0 \to 0_+$). Điều ta quan tâm trước tiên là: với thế (4.41) hệ có các trạng thái gián đoạn hay không? Nếu có thì chúng phụ thuộc vào V_0 như thế nào? Để trả lời câu hỏi này ta phải tìm hàm Green và kiểm tra xem nó có cực đơn giản trong miền năng lượng $[-V_0, 0]$ hay không.

Theo hệ thức cơ bản (4.3), ta có hàm Green

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta) &= G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta) - V_0 \int_{\Omega_0} d\mathbf{r}_1\, G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1; \eta)\, G_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'; \eta) \\ &+ V_0^2 \int_{\Omega_0} d\mathbf{r}_1 \int_{\Omega_0} d\mathbf{r}_2\, G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1; \eta)\, G_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \eta)\,. \\ &\qquad G_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'; \eta) + \ldots\,, \end{aligned} \tag{4.42}$$

trong đó V_0 là biên độ thế (4.41), hàm Green không nhiễu loạn G_0 của hạt tự do có dạng phụ thuộc vào số chiều của hệ khảo sát (xem 2.4.2).

Trường hợp 3 chiều. Hàm Green tự do là (2.102):

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\exp(-k_0\,|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)\,;$$

$k_0 = \sqrt{2m\,|E|/\hbar^2} \geq 0$. Hàm này là hữu hạn ngay cả ở năng lượng E gần 0. Khi đó, tích phân (4.42) là hữu hạn, và do đó chuỗi luỹ thừa theo V_0 ($V_0 \to 0_+$) bên vế phải của (4.42) là hội tụ. Hiệu ($G - G_0$) vì vậy sẽ dần đến không khi $V_0 \to 0_+$. Nói khác, trong giới hạn $V_0 \to 0_+$ hai hàm G và G_0 sẽ có cùng dáng điệu giải tích. Vì hàm G_0 là hữu hạn tại mọi E thuộc $[-V_0, 0]$, thì hàm G tất nhiên cũng không thể có cực trong miền này. Và như vậy, ta đã dẫn ra một kết luận quan trọng: trong hệ 3 chiều, các

hố thế nông (V_0 nhỏ) có thể không làm xuất hiện các mức gián đoạn. Để có mức gián đoạn, đại lượng $V_0 \Omega_0$ phải lớn hơn một giá trị nhất định nào đó.

Trường hợp 2 chiều. Hàm Green tự do là (2.106):

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{m}{\pi\hbar^2} K_0(k_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|),$$

$k_0 = \sqrt{2m|E|/\hbar^2} \geq 0$.
Vì khi $V_0 \to 0_+$ thì $|E| \to 0_+$ và $k_0 \to 0_+$, ta có thể khai triển hàm K_0 theo biến nhỏ. Giữ lại chỉ số hạng đầu, ta có

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \frac{m}{\pi\hbar^2} \ln(k_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) + \ldots$$

Thay vào (4.42) các G_0 trong gần đúng này, rồi chỉ giữ lại số hạng chính ta được:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) &\approx G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \sum_n \left[-\frac{V_0\Omega_0 m}{\pi\hbar^2} \ln\left(k_0\sqrt{S}\right)\right]^n \\ &= G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \Big/ \left(1 + \frac{V_0\Omega_0 m}{\pi\hbar^2} \ln\left(k_0\sqrt{S}\right)\right), \end{aligned} \tag{4.43}$$

trong đó, S là một hằng số có thứ nguyên diện tích và có giá trị cỡ Ω_0. Muốn tính chính xác S ta phải lấy các tích phân dạng:

$$\int d\mathbf{r}_1 \ldots \int d\mathbf{r}_n \ln|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1| \ldots \ln|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n| .$$

Nhưng, trong phạm vi thảo luận ở đây quan trọng không phải là giá trị cụ thể của S mà là, theo (4.43) thì ngay cả khi V_0 nhỏ, $V_0 \to 0_+$, hàm Green $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ vẫn có cực tại E_0 xác định bởi:

$$E_0 \to -\frac{\hbar^2}{2mS} \exp\left(-\frac{2\pi\hbar^2}{mV_0\Omega_0}\right) \equiv -\frac{\hbar^2}{2mS} \exp\left(-\frac{1}{\rho_0 V_0\Omega_0}\right), \tag{4.44}$$

trong đó $\rho_0 = m/2\pi\hbar^2$ là mật độ trạng thái của hệ hai chiều. Và như vậy, ta đi đến một kết luận quan trọng : trong hệ hai chiều luôn tồn tại mức gián

đoạn, cho dù hố thế có nông bao nhiêu chăng nữa. Kết quả này liên quan mật thiết với dáng điệu của $G_0(E)$ hay $\rho_0(E)$ ở gần ngưỡng vùng $E = 0$. Chính sự phân kỳ logarit của G_0 đã làm xuất hiện mức gián đoạn E_0, mà vị trí của nó phụ thuộc theo hàm e mũ vào $V_0\Omega_0$ và ρ_0 như ở (4.44). Kết luận này có giá trị tổng quát cho mọi trường hợp, khi có sự gián đoạn của mật độ trạng thái tại ngưỡng vùng. Vấn đề thảo luận ở đây có liên quan chặt chẽ với nhiều bài toán quan trọng (định xứ, siêu dẫn ...) trong các hệ 2 chiều.

Trường hợp 1 chiều. Hàm Green tự do có dạng (2.110)

$$G_0(x, x'; E) = -\frac{m}{\hbar^2 k_0}\exp(-k_0|x-x'|);$$

$k_0 = \sqrt{2m|E|/\hbar^2} \geq 0$.

Vì trong giới hạn $V_0 \to 0_+$ có $|E| \to 0_+$ và $k_0 \to 0_+$, nên hàm G_0 ở trên có thể gần đúng bằng:

$$G_0(x, x'; E) \xrightarrow[E \to 0_-]{} \sqrt{-m/2\hbar^2 E}\,.$$

Thay hàm này vào (4.42), ta có

$$\begin{aligned} G(x, x'; E) &\approx G_0(x, x'; E)\sum(-G_0 V_0 \Omega_0)^n \\ &= \frac{G_0(x, x'; E)}{1 + G_0 V_0 \Omega_0} \\ &\approx G_0\Big/\left(1 - \Omega_0 V_0\sqrt{-m/2\hbar^2 E}\right)\,. \end{aligned} \tag{4.45}$$

Hàm Green (4.45) có cực (trùng với mức gián-đoạn) tại

$$E_0 = -m(\Omega_0 V_0)^2/2\hbar^2\,, \tag{4.46}$$

trong đó Ω_0 là độ rộng của hố thế 1 chiều. Như vậy, tương tự với hệ 2 chiều, trong hệ 1 chiều luôn tồn tại mức gián đoạn cho dù hố thế nông bao nhiêu chăng nữa. Tuy nhiên, khác với hệ 2 chiều, mức gián đoạn 1 chiều (4.46) là hàm giải tích rõ ràng của $\Omega_0 V_0$: $E_0 \propto -(\Omega_0 V_0)^2$, khi $\Omega_0 V_0 \to 0^+$. Dáng điệu này liên quan với thực tế là trong hệ một chiều ở gần ngưỡng vùng ($E = 0$) hàm G_0 (hay ρ_0) có kỳ dị dạng $\propto \left(\sqrt{E}\right)^{-1}$, trong khi ở hệ 2 chiều ta có kỳ dị dạng logarit.

4.3 Nhiễu loạn phụ thuộc thời gian

Mục đích của bài toán nhiễu loạn phụ thuộc thời gian là tìm hàm riêng của Hamiltonian toàn phần phụ thuộc thời gian:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = \mathcal{H}\psi(t);\ \mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + V(t). \tag{4.47}$$

Hiển nhiên là ở đây ta không thể nói gì về trị riêng vì với Hamiltonian phụ thuộc thời gian, nói chung, không còn khái niệm trạng thái dừng với năng lượng xác định.

Trong tiết 3.1 ta đã chỉ ra rằng, lời giải tổng quát của (4.47) có thể viết dưới dạng:

$$\psi(t) = S(t, -\infty)\,\phi_0, \tag{4.48}$$

trong đó ϕ_0 là trạng thái cơ bản của $\mathcal{H}_0$, còn $S(t, t')$ là S ma trận, có dạng một chuỗi vô hạn của thế nhiễu loạn $V(t)$:

$$\begin{aligned} S(t, t') &= 1 + \sum_n \frac{(-i)^n}{n!}\int_{t'}^{t} dt_1 \int_{t'}^{t} dt_2 \ldots \\ &\qquad \int_{t'}^{t} dt_n\, T\left(V(t_1)\, V(t_2)\, \ldots\, V(t_n)\right) \\ &= T\exp\left(-i\int_{t'}^{t} dt_1\, V(t_1)\right). \end{aligned} \tag{4.49}$$

Phương trình tiến hóa (4.48) cho phép xác định $\psi(t)$ dưới dạng chuỗi của nhiễu loạn V.

Tương ứng, hàm Green của phương trình

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H}\right) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\,\delta(t - t'), \tag{4.50}$$

cũng biểu diễn được qua S-matrận:

$$G(p, t - t') = \frac{TS}{MS}, \tag{4.51}$$

trong đó:

$$
\begin{aligned}
TS &= -i\ {}_0\langle |\, T\,\hat{C}_p(t)\,\hat{C}_p^+(t')\,|\rangle_0 \\
&\quad + (-i)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1\ {}_0\langle |\, T\,\hat{C}_p(t)\,\hat{V}(t_1)\,\hat{C}_p^+(t')\,|\rangle_0 \\
&\quad + \frac{(-i)^3}{2!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2\ {}_0\langle |\, T\hat{C}_p(t)\,\hat{V}(t_1)\,. \\
&\qquad\qquad \hat{V}(t_2)\,\hat{C}_p^+(t')\,|\rangle_0 + \dots \qquad (4.52) \\
MS &= {}_0\langle |\, S(\infty, -\infty)\,|\rangle_0 \,.
\end{aligned}
$$

Số hạng đầu tiên trong chuỗi (4.52) chính là hàm Green tự do tương ứng Hamiltonian $\mathcal{H}_0$:

$$
-i\ {}_0\langle |\, T\,\hat{C}_p(t)\,\hat{C}_p^+(t')\,|\rangle_0 = G_0(p, t - t')\,. \qquad (4.53)
$$

Để đánh giá các số hạng tiếp theo, tiện lợi nhất là dùng kỹ thuật giản đồ Feynman (Feynman 1951). Nội dung của kỹ thuật này, áp dụng cho các loại tương tác khác nhau (electron-electron, electron-phonon, electron-tâm tạp), được trình bày rất hệ thống trong cuốn sách của Mahan (Mahan 2000). Cách vẽ các giản đồ Feynman cho hàm Green một hạt được minh họa rất chi tiết ở Phụ lục X trong cuốn sách của March và đồng tác giả (March *et al.* 1967). Trong phạm vi cuốn sách này, chủ yếu dành cho các bài toán một electron, chúng tôi chỉ giới thiệu tóm tắt nội dung chính của vấn đề.

4.3.1 Định lý Wick

Nói chung, các biểu thức dưới dấu tích phân trong chuỗi (4.52) có dạng:

$$
{}_0\langle |\, T\,\hat{C}_p(t)\,\hat{V}(t_1)\dots\hat{V}(t_n)\,\hat{C}_p^+(t')\,|\rangle_0 \,.
$$

Mỗi toán tử $\hat{V}$ ở đây lại có thể biểu diễn dưới dạng tích của các toán tử sinh, hủy, tùy theo dạng tương tác. Chẳng hạn, với tương tác electron-electron:

$$
\hat{V}(t) = \frac{1}{2}\sum v_q C_{k+q}^+ C_{k'-q}^+ C_{k'} C_k \exp\{it\,(\xi_{k+q} + \xi_{k'-q} - \xi_k - \xi_{k'})\},
$$

trong đó $v_q = 4\pi e^2/q^2$ là biến đổi Fourier của thế tương tác Coulomb e^2/r (Mahan 2000). Như vậy, nói chung, các biểu thức toán tử cần quan tâm có dạng:

$$_0\langle| T\, \hat{C}_p(t)\, \hat{C}_g^+(t_1) \ldots \hat{C}_h(t_n)\, \hat{C}_p^+(t')\, |\rangle_0 \,. \qquad (4.54)$$

Trong mỗi tích, số toán tử sinh bao giờ cũng bằng số toán tử hủy.

Xét mỗi tích (4.54) ta thấy, bởi vì hệ xuất phát từ trạng thái cơ bản $|\rangle_0$, và cuối cùng lại trở về trạng thái đó, nên nếu một hạt được sinh ra tại thời điểm t_i nào đó, thì nó phải bị hủy ở thời điểm $t_j > t_i$. Nói khác, trong tích (4.54) mỗi toán tử sinh $\hat{C}_q^+(t_m)$ phải có một toán tử hủy $\hat{C}_{q'}(t_n)$ nào đó để ghép thành một cặp. Thêm vào đó, đại lượng $_0\langle| T\, \hat{C}_{q'}(t_n)\, \hat{C}_q^+(t_m)\, |\rangle_0$ chỉ khác không khi $q = q'$. Thành ra, trong rất nhiều cách sắp xếp có thể của các toán tử nằm sau T-tích chỉ một số cách có ý nghĩa vật lý. Các cách này được xác định bằng định lý Wick, phát biểu như sau: trung bình đối với T-tích của một số toán tử nào đó bằng tổng theo các cách ghép cặp có thể, trong đó mỗi số hạng có dạng tích các trung bình T-tích của tất cả các cặp. Mỗi cặp đều tuân theo trật tự thời gian đúng, nên toàn bộ tích tuân theo trật tự thời gian đúng. Ví dụ,

$$\begin{aligned} &_0\langle| T\, \hat{C}_\alpha(t)\, \hat{C}_\beta^+(t_1)\, \hat{C}_\gamma(t_2)\, \hat{C}_\delta^+(t')\, |\rangle_0 = \\ &\qquad = \delta_{\alpha\beta}\, \delta_{\gamma\delta}\; {}_0\langle| T\, \hat{C}_\alpha(t)\, \hat{C}_\alpha^+(t_1)\, |\rangle_0\; {}_0\langle| T\, \hat{C}_\gamma(t_2)\, \hat{C}_\gamma^+(t')\, |\rangle_0 \\ &\qquad - \delta_{\alpha\delta}\, \delta_{\beta\gamma}\; {}_0\langle| T\, \hat{C}_\alpha(t)\, \hat{C}_\alpha^+(t')\, |\rangle_0\; {}_0\langle| T\, \hat{C}_\gamma(t_2)\, \hat{C}_\gamma^+(t_1)\, |\rangle_0 \,. \end{aligned} \qquad (4.55)$$

Ở đây, trung bình T-tích của 4 toán tử, theo định lý Wick, được phân tích thành tổng của hai số hạng, tương ứng hai cách ghép cặp có thể. Mỗi số hạng trong tổng là tích của hai trung bình T-tích cặp. Nói chung, nếu trong (4.54) có n toán tử sinh (và từng ấy toán tử hủy) thì sẽ có $n!$ cách ghép cặp, nghĩa là, khai triển Wick gồm $n!$ số hạng, mỗi số hạng là tích của n trung bình T-tích cặp.

Để xem xét tiếp các trung bình T-tích cặp $_0\langle| T\, \hat{C}_k(t_1)\, \hat{C}_k^+(t_2)\, |\rangle_0$ ta cần biết quan hệ giữa hai thời gian trong đó. Nếu $t_1 > t_2$, thì ta có (4.53):

$$_0\langle| T\, \hat{C}_k(t_1)\, \hat{C}_k^+(t_2)\, |\rangle_0 = i\, G_0(k,\, t_1 - t_2)\,, \qquad (4.56)$$

còn nếu $t_1 = t_2$ thì

$$_0\langle| T\, \hat{C}_k^+(t_1)\, \hat{C}_k(t_1)\, |\rangle_0 = n_F(\xi_k) \qquad (4.57)$$

với $n_F(\xi_k)$ là toán tử số hạt (không phụ thuộc thời gian).

Kết hợp phân tích (4.55) với các hệ thức (4.56) và (4.57), định lý Wick cho phép ta khai triển các trung bình dạng (4.54) thành một tổng dạng (4.55), mà mỗi số hạng trong đó là tích của các hàm Green tự do (4.56) hay các toán tử số hạt (4.57).

Ở trên ta xem xét trường hợp tương tác electron-electron, khi đó sau T-tích trong (4.54) tất cả các toán tử là cùng loại. Nếu electron tương tác với một giả hạt (kích thích) khác, thì trong thế tương tác V có các toán tử khác loại, biểu diễn các hạt (kích thích) khác nhau. Xét cụ thể trường hợp tương tác electron-phonon với thế tương tác (Mahan 2000):

$$V = \sum_{q,k} M_q B_q C_{k+q}^+ C_k, \tag{4.58}$$

trong đó M_q là yếu tố ma trận tương tác. Với thế tương tác (4.58), nói chung các trung bình T-tích dưới dấu tích phân trong chuỗi (4.52) có dạng:

$${}_0\langle| T\, \hat{C}_p(t)\, \hat{C}_g^+(t_1)\, \hat{B}_q(t_1) \ldots \hat{C}_h(t_n)\, \hat{B}_{q'}(t_n)\, \hat{C}_p^+(t')\, |\rangle_0 \; .$$

Vì các toán tử khác loại luôn giao hoán với nhau, nên biểu thức trên có thể tách thành hai thừa số tách biệt

$${}_0\langle| T\, \hat{C}_p(t)\, \hat{C}_g^+(t_1) \ldots \hat{C}_h(t_n)\, \hat{C}_p^+(t')\, |\rangle_0 \; {}_0\langle| \hat{B}_q(t_1) \ldots \hat{B}_{q'}(t_n)\, |\rangle_0 \; .$$

Ở thừa số đầu trung bình lấy theo trạng thái cơ bản của hệ electron, còn ở thừa số sau trung bình theo trạng thái cơ bản của hệ phonon. Mỗi thừa số bao gồm chỉ các toán tử cùng loại, được khai triển theo định lý Wick. Thừa số thứ nhất của các toán tử electron vừa khảo sát ở trên. Với thừa số của các toán tử phonon, ta có, chẳng hạn:

$$\begin{aligned}
{}_0\langle| T\, \hat{B}_{q_1}(t_1)\, \hat{B}_{q_2}(t_2)\, \hat{B}_{q_3}(t_3)\, \hat{B}_{q_4}(t_4)\, |\rangle_0 &= \\
= \;& {}_0\langle| T\, \hat{B}_{q_1}(t_1)\, \hat{B}_{q_2}(t_2)\, |\rangle_0 \; {}_0\langle| \hat{B}_{q_3}(t_3)\, \hat{B}_{q_4}(t_4)\, |\rangle_0 + \\
& {}_0\langle| T\, \hat{B}_{q_1}(t_1)\, \hat{B}_{q_3}(t_3)\, |\rangle_0 \; {}_0\langle| \hat{B}_{q_2}(t_2)\, \hat{B}_{q_4}(t_4)\, |\rangle_0 + \\
& {}_0\langle| T\, \hat{B}_{q_1}(t_1)\, \hat{B}_{q_4}(t_4)\, |\rangle_0 \; {}_0\langle| \hat{B}_{q_2}(t_2)\, \hat{B}_{q_3}(t_3)\, |\rangle_0 \\
= \;& \delta_{q_1+q_2}\delta_{q_3+q_4}\, D_0(q_1, t_1 - t_2)\, D_0(q_3, t_3 - t_4) + \\
& \delta_{q_1+q_3}\delta_{q_2+q_4}\, D_0(q_1, t_1 - t_3)\, D_0(q_2, t_2 - t_4) + \\
& \delta_{q_1+q_4}\delta_{q_2+q_3}\, D_0(q_1, t_1 - t_4)\, D_0(q_2, t_2 - t_3) \, .
\end{aligned}$$

Ở đây, chú ý là, trung bình của T-tích cặp ${}_0\langle|\, T\, \hat{B}_{q_i}(t_i)\, \hat{B}_{q_j}(t_j)\,|\rangle_0$ chỉ khác không và bằng $D_0(q_i, t_i - t_j)$ khi $q_i + q_j = 0$.

Để minh họa cho tất cả những điều trình bày ở trên, ta xét một ví dụ cụ thể: tính ba số hạng đầu của chuỗi (4.52) cho trường hợp tương tác electron-phonon với thế tương tác (4.58). Ta lần lượt xét:

Số hạng thứ nhất ($n = 0$) không phụ thuộc vào V và chính là hàm Green tự do (4.53).

Số hạng thứ hai ($n = 1$) chứa một toán tử V. Biểu thức trong trung bình dưới dấu tích phân ở số hạng này có dạng

$$ {}_0\langle|\, T\, \hat{C}_p(t)\, \hat{C}^+_{k+q}(t_1)\, \hat{C}_k(t_1)\, \hat{C}^+_p(t')\,|\rangle_0 \; {}_0\langle|\, T\, \hat{B}_q\,|\rangle_0 \,. $$

Vì cả ${}_0\langle|\, T\, b_q\,|\rangle_0$ lẫn ${}_0\langle|\, T\, b^+_q\,|\rangle_0$ đều bằng không, suy-ra ${}_0\langle|\, T\, \hat{B}_q\,|\rangle_0 = 0$ và do đó biểu thức trên, tức là số hạng thứ hai trong chuỗi (4.52), là bằng không. Một cách tổng quát, dễ thấy rằng, với tương tác electron-phonon, trong chuỗi nhiễu loạn (4.52) tất cả các số hạng với n lẻ đều cho đóng góp bằng không.

Số hạng thứ ba ($n = 2$), sau khi thay V bằng (4.58), có dạng

$$ -\frac{(i)^3}{2!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \sum_{q_1, q_2} M_{q_1} M_{q_2}\; {}_0\langle|\, T\, B_{q_1}(t_1)\, B_{q_2}(t_2)\,|\rangle_0 $$
$$ \sum_{k_1, k_2} {}_0\langle|\, T\, \hat{C}_p(t)\, \hat{C}^+_{k_1+q_1}(t_1)\, \hat{C}_{k_1}(t_1)\, \hat{C}^+_{k_2+q_2}(t_2)\, \hat{C}_{k_2}(t_2)\, \hat{C}^+_p(t')\,|\rangle_0 \qquad (4.59) $$

Nhân tử trung bình theo trạng thái phonon bằng:

$$ {}_0\langle|\, T\, B_{q_1}(t_1)\, B_{q_2}(t_2)\,|\rangle_0 = i\,\delta_{q_1+q_2}\, D_0(q_1, t_1 - t_2)\,. \qquad (4.60) $$

Nhân tử trung bình theo trạng thái electron gồm 3 toán tử sinh, 3 toán tử hủy. Khai triển Wick trung bình của T-tích này sẽ gồm 6 số hạng, ứng với

6 cách ghép cặp:

$$
\begin{aligned}
{}_0\langle| T\hat{C}_p(t)\,\hat{C}^+_{k_1+q_1}(t_1)\,\hat{C}_{k_1}(t_1)\,\hat{C}^+_{k_2+q_2}(t_2)\,\hat{C}_{k_2}(t_2)\,\hat{C}^+_p(t')\,|\rangle_0 = \\
= \ & {}_0\langle| T\,\hat{C}_p(t)\,\hat{C}^+_{k_1+q_1}(t_1)\,|\rangle_0\ {}_0\langle| T\,\hat{C}_{k_1}(t_1)\,\hat{C}^+_{k_2+q_2}(t_2)\,|\rangle_0 \\
& \qquad {}_0\langle| T\,\hat{C}_{k_2}(t_2)\,\hat{C}^+_p(t')\,|\rangle_0 + \\
+ \ & {}_0\langle| T\,\hat{C}_p(t)\,\hat{C}^+_{k_2+q_2}(t_2)\,|\rangle_0\ {}_0\langle| T\,\hat{C}_{k_2}(t_2)\,\hat{C}^+_{k_1+q_1}(t_1)\,|\rangle_0 \\
& \qquad {}_0\langle| T\,\hat{C}_{k_1}(t_1)\,\hat{C}^+_p(t')\,|\rangle_0 \\
+ \ & {}_0\langle| T\,\hat{C}_p(t)\,\hat{C}^+_{k_1+q_1}(t_1)\,|\rangle_0\ {}_0\langle| T\,\hat{C}_{k_1}(t_1)\,\hat{C}^+_p(t')\,|\rangle_0 \\
& \qquad {}_0\langle|\,\hat{C}^+_{k_2+q_2}(t_2)\,\hat{C}_{k_2}(t_2)\,|\rangle_0 \\
+ \ & {}_0\langle| T\,\hat{C}_p(t)\,\hat{C}^+_p(t')\,|\rangle_0\ {}_0\langle|\,\hat{C}^+_{k_1+q_1}(t_1)\,\hat{C}_{k_1}(t_1)\,|\rangle_0 \\
& \qquad {}_0\langle|\,\hat{C}^+_{k_2+q_2}(t_2)\,\hat{C}_{k_2}(t_2)\,|\rangle_0 \\
+ \ & {}_0\langle| T\,\hat{C}_p(t)\,\hat{C}^+_{k_2+q_2}(t_2)\,|\rangle_0\ {}_0\langle|\,\hat{C}_{k_1+q_1}(t_1)\,\hat{C}_{k_1}(t_1)\,|\rangle_0 \\
& \qquad {}_0\langle|\,\hat{C}_{k_2}(t_2)\,\hat{C}^+_p(t')\,|\rangle_0 \\
- \ & {}_0\langle| T\,\hat{C}_p(t)\,\hat{C}^+_p(t')\,|\rangle_0\ {}_0\langle| T\,\hat{C}_{k_1}(t_1)\,\hat{C}^+_{k_2+q_2}(t_2)\,|\rangle_0 \\
& \qquad {}_0\langle| T\,\hat{C}_{k_2}(t_2)\,\hat{C}^+_{k_1+q_1}(t_1)\ .
\end{aligned}
$$

Chú ý là, dấu trừ ở số hạng cuối cùng liên quan với một số lẻ lần hoán vị các toán tử fermion.

Sử dụng các hệ thức (4.56), (4.57) và tính đến điều kiện $q_1 = -q_2$ ở (4.60), tổng trên có thể viết lại dưới dạng:

$$
\begin{aligned}
& i^3\delta(p = k_1 + q_1 = k_2)\,G_0(p,\,t - t_1)\,G_0(p - q_1,\,t_1 - t_2) \\
& \qquad G_0(p,\,t_2 - t') + \\
+ \ & i^3\delta(p = k_1 = k_2 - q_1)\,G_0(p,\,t - t_2)\,G_0(p + q_1,\,t_2 - t_1) \\
& \qquad G_0(p,\,t_1 - t') + \\
+ \ & i^2\delta(q_1 = 0)\,\delta(p = k_1)\,n_F(\xi_{k_2})\,G_0(p,\,t - t_1)\,G_0(p,\,t_1 - t') \\
+ \ & i\delta(q_1 = 0)\,\delta(q_2 = 0)\,n_F(\xi_{k_1})\,n_F(\xi_{k_2})\,G_0(p,\,t - t')
\end{aligned}
$$

$$+ \quad i^2\delta(q_1 = 0)\,\delta(p = k_2)\, n_F(\xi_{k_1})\, G_0(p, t - t_2)\, G_0(p, t_2 - t')$$
$$- \quad i^3\delta(k_1 = k_2 - q_1)\, G_0(p, t - t')\, G_0(k_1, t_1 - t_2)$$
$$G_0(k_1 + q_1, t_2 - t_1) \; . \qquad (4.61)$$

Thay (4.60) và (4.61) vào (4.59) ta được số hạng $n = 2$ trong chuỗi (4.52). Ta thấy, biểu thức rất cồng kềnh dù mới chỉ với $n = 2$. Nếu với $n = 4$, số số hạng trong khai triển Wick của biểu thức trung bình dưới dấu tích phân sẽ lên tới con số $3 \times 4! = 72$. Trước khó khăn như vậy, Feynman đã đề xuất một phương pháp rất đơn giản và hiệu quả: mô tả các số hạng loại (4.61) bằng hình vẽ - các giản đồ Feynman.

4.3.2 Giản đồ Feynman

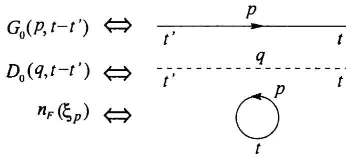
Để cụ thể, ta tiếp tục bài toán tương tác electron-phonon. Các số hạng dạng (4.60), (4.61) có thể mô tả bằng các giản đồ với quy ước như sau (hình 4.1):

(1) Mỗi hàm Green electron tự do $G_0(p, t - t')$ mô tả bằng một đường liền nét, đi từ t' đến t. Mũi tên trên đường dùng để chỉ hướng, nhưng không nhất thiết ngụ ý $t > t'$.

(2) Mỗi hàm Green phonon tự do $D_0(q, t - t') \equiv D_0(-q, t' - t)$ mô tả bằng một đường đứt nét, trên đó không có mũi tên chỉ hướng.

(3) Số choán đầy $n_F(\xi_p) = {}_0\langle|\, C_p^+(t)\, C_p(t)\, |\rangle_0$ mô tả bằng một vòng kín, đó chính là một đường electron bắt đầu và kết thúc ở cùng một điểm.

Với những quy ước này sáu số hạng của (4.59), là tích của (4.60) với tổng



Hình 4.1:

(4.61), có thể biểu diễn bằng các giản đồ theo thứ tự từ (a) đến (f) trên hình

4.2 (tương ứng với các số hạng từ trên xuống dưới trong (4.61)). Trong mỗi giản đồ có một đường phonon, mô tả (4.60), nối t_1 và t_2.

Ba giản đồ (c), (d) và (e) chứa nhân tử $\delta\left(q_1=0\right)$. Vì không có phonon với vectơ sóng $q_1=0$, nên các số hạng tương ứng với ba giản đồ này cho đóng góp bằng không.

Hai giản đồ (a) và (b) cho đóng góp khác không. Theo (4.60) và (4.61) đóng góp của hai giản đồ này, viết gộp lại là:

$$\frac{1}{2!}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \sum_q |M_q|^2 D_0\left(q,\, t_1-t_2\right)$$
$$\left[G_0\left(p,\, t-t_1\right) G_0\left(p-q,\, t_1-t_2\right) G_0\left(p,\, t_2-t'\right) + G_0\left(p,\, t-t_2\right) G_0\left(p+q,\, t_2-t_1\right) G_0\left(p,\, t_1-t'\right)\right] .$$

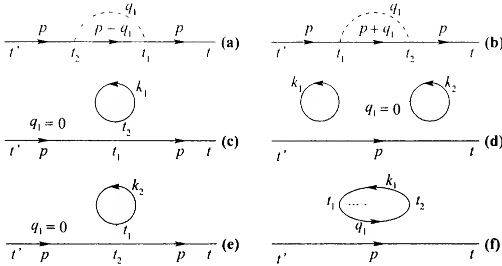
Để ý là số hạng thứ hai trong ngoặc vuông sẽ trùng với số hạng thứ nhất, nếu ta đánh tráo hai biến câm (tích phân) $t_1 \leftrightarrow t_2$, đồng thời thay $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{q}$. Hơn nữa, hai biến đổi đồng thời này không làm thay đổi hàm D_0 ở trước ngoặc $\left(D_0\left(q,\, t_1-t_2\right)=D_0\left(-q,\, t_2-t_1\right)\right)$. Điều này nghĩa là, hai giản đồ (a) và (b) cho đóng góp như nhau. Các giản đồ cho cùng một đóng góp gọi là các giản đồ tương đương. Như vậy, để tính đóng góp của tất cả các giản đồ tương đương ta chỉ cần tính đóng góp của một giản đồ rồi nhân với số giản đồ tương đương. Trong ví dụ đang khảo sát số giản đồ tương đương là 2. Con số này vừa vặn khử hết với mẫu số trước tích phân $n!=2!=2$.

Một cách tổng quát, dễ dàng kiểm tra rằng, với các giản đồ bậc n bất kỳ, mỗi giản đồ liên kết cho đóng góp khác không đều thuộc về một nhóm các giản đồ tương đương. Số giản đồ trong mỗi nhóm đều bằng $n!$ (vừa vặn khử với mẫu số $n!$ ở phía trước tích phân). Điều này có ý nghĩa thực tiễn quan trọng: thay vì tính tổng đóng góp của các giản đồ liên kết, rồi chia cho $n!$, ta chỉ cần tính đóng góp của các giản đồ liên kết không tương đương, đồng thời bỏ nhân tử $(1/n!)$.

Giản đồ (f) trên hình (4.2) gồm hai phần tách biệt nhau: một đường electron và một giản đồ bong bóng. Đóng góp của giản đồ này viết được dưới dạng

$$G_0\left(p,\, t-t'\right)\, F_1\, ,$$

trong đó nhân tử F_1 tương ứng giản đồ bong bóng có dạng



Hình 4.2: (a) - (b) - (c) - (d) - (e) - (f)

$$F_1 = \frac{-i}{2!}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \sum_{k,q} |M_q|^2 D_0\left(q,\, t_1 - t_2\right)$$
$$G_0\left(k,\, t_1 - t_2\right) G_0\left(k + q,\, t_2 - t_1\right) \qquad (4.62)$$

Đây là một giản đồ không liên kết (những giản đồ, mà mỗi phần của nó không được nối với tất cả các phần khác, được gọi là không liên kết). Việc tính các giản đồ không liên kết quy về tính các nhân tử F_i dạng (4.62) hoặc phức tạp hơn (ở bậc cao). Tuy nhiên, trong thực tế việc này không cần thiết vì có một định lý quan trọng khẳng định rằng, trong hàm Green (4.51) các giản đồ không liên kết ở tử số (TS) dẫn đến một nhân tử đúng bằng mẫu số (MS). Chúng khử nhau, và kết quả là hàm Green chỉ còn bằng tổng các số hạng tương ứng với các giản đồ liên kết (xem chứng minh chi tiết trong Abrikosov *et al.* 1963). Phối hợp định lý này với nhận xét ở trên về các giản đồ liên kết tương đương, thay cho (4.51) ta viết được hàm Green dưới dạng đơn giản hơn:

$$G_0\left(p,\, t - t'\right) = -i \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \ldots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \; {}_0\langle|\, T\, \hat{C}_p\left(t\right)$$
$$\hat{C}_p^+\left(t'\right) \hat{V}\left(t_1\right) \ldots \hat{V}\left(t_n\right) |\rangle_0 , \qquad (4.63)$$

chỉ tính đến các giản đồ liên kết không tương đương. Kết luận này làm đơn giản rất nhiều việc tính hàm Green của các hệ electron có tương tác. Tất nhiên là việc tính các giản đồ liên kết cũng không đơn giản và phụ thuộc vào bài toán cụ thể.

4.3.3 Phương trình Dyson

Trong nhiều tính toán các hàm Green năng lượng tỏ ra tiện lợi hơn các hàm thời gian. Hàm Green năng lượng đối với electron được định nghĩa là:

$$G(p,\, E) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\left(i\,E\,(t-t')\right)\, G(p,\, t-t')\,. \qquad (4.64)$$

Tương tự, hàm Green năng lượng đối với phonon là:

$$D(q,\, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\left(i\,\omega\, t\right)\, D(q,\, t)\,. \qquad (4.65)$$

Các hàm Green năng lượng không nhiễu loạn, $G_0(p,\, E)$ và $D_0(q,\, \omega)$ đã được tính trong chương 3 (công thức (3.33) và (3.36) cho $G_0(p,\, E)$; công thức (3.81) cho $D_0(q,\, \omega)$).

Thực hiện biến đổi (4.64) cho cả hai vế của (4.63), tích phân theo thời gian sẽ tác dụng lên từng hàm Green tự do của khai triển Wick, chuyển nó thành hàm Green năng lượng tương ứng. Kết quả là, viết rõ đến số hạng $n = 2$ (tương ứng các giản đồ trên hình 4.2), dạng phụ thuộc năng lượng của hàm Green (4.63) với thế tương tác electron phonon (4.58) có dạng đơn giản:

$$G(p,\, E) = G_0(p,\, E) + \left(G_0(p,\, E)\right)^2 \Sigma^{(1)}(p,\, E) + \ldots, \qquad (4.66)$$

trong đó năng lượng riêng (self-energy)

$$\Sigma^{(1)}(p,\, E) = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \sum_q |M_q|^2 D_0(q,\, \omega)\, G_0(p-q,\, E-\omega)\,. \qquad (4.67)$$

Hệ thức (4.66) có thể minh họa bằng sơ đồ:

G = G_0 + G_0 $\Sigma^{(1)}$ G_0 + ...

Số hạng khác không tiếp theo, $n = 4$, của chuỗi (4.63) khi chuyển sang dạng phụ thuộc năng lượng cho đóng góp bằng

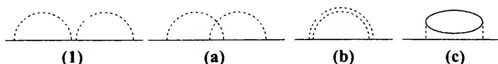
$$G_0^3\left(\Sigma^{(1)}\right)^2 + G_0^2\left(\Sigma^{(2a)} + \Sigma^{(2b)} + \Sigma^{(2c)}\right).$$

Bốn số hạng trong biểu thức này lần lượt tương ứng với các giản đồ hai phonon (1), (a), (b) và (c) trên hình 4.3. Ta viết lại biểu thức trên dưới dạng:

$$G_0^2\Sigma^{(2)} + G_0\left(G_0\Sigma^{(1)}\right)^2, \tag{4.68}$$

trong đó $\Sigma^{(2)} = \Sigma^{(2a)} + \Sigma^{(2b)} + \Sigma^{(2c)}$.
Kết hợp (4.66) và (4.68) ta được:

$$G = G_0 + G_0\left(\Sigma^{(1)} + \Sigma^{(2)}\right)\{G_0 + G_0[\ldots]\}. \tag{4.69}$$



Hình 4.3: Các giản đồ hai phonon trong năng lượng riêng electron

Nếu quá trình tính toán tiếp diễn mãi, tính đến tất cả các số hạng của chuỗi (4.63) thì tổng trong ngoặc đơn ở (4.69) sẽ là năng lượng riêng toàn phần

$$\Sigma = \sum_{(i)} \Sigma^{(i)}. \tag{4.70}$$

Ở đây, tổng lấy theo một số vô hạn các giản đồ năng lượng riêng tối giản (tức là các giản đồ không thể chia thành hai giản đồ năng lượng riêng nối với nhau chỉ bằng một đường G_0). Đồng thời, vì chuỗi là vô hạn, nên phần

trong ngoặc móc chẳng phải gì khác, mà chính là hàm G. Thành thử, tính đến đóng góp của tất cả các số hạng, hệ thức (4.69) trở thành

$$G(p, E) = G_0(p, E) + G_0(p, E)\Sigma G(p, E),$$

hay

$$G(p, E) = \frac{G_0(p, E)}{1 - G_0(p, E)\Sigma(p, E)}. \tag{4.71}$$

Đây chính là phương trình Dyson. Tất nhiên, chứng minh chính xác phương trình này là một bài toán phức tạp và ở đây chúng tôi chỉ hạn chế với dẫn dắt định tính như trên. Quan trọng là phương trình Dyson có dạng rất đơn giản và đẹp. Nó khẳng định rằng, bằng cách tính năng lượng riêng Σ ta có thể tính chính xác hàm Green toàn phần G. Trong thực tế, nói chung, không thể tính hết mọi số hạng trong tổng (4.70), tức là không thể tính chính xác Σ, mà thường chỉ dừng lại ở vài số hạng bậc thấp. Tính đến bao nhiêu số hạng là tùy yêu cầu và khả năng tính toán. Dù thế nào, thì kết quả nhận được càng chính xác nếu nhiễu loạn càng yếu.

Thảo luận bổ sung và bài tập

B4.1 Phương trình (4.47) có thể viết dưới dạng

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H}_0\right)|\psi(t)\rangle = V(t)|\psi(t)\rangle. \tag{4.72}$$

Gọi $|\phi(t)\rangle$ là lời giải của phương trình đồng nhất tương ứng, thì theo (2.53) lời giải của phương trình không đồng nhất (4.72) có dạng:

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= |\phi(t)\rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dt'\, g^+(t-t')\, V(t')\, |\psi(t')\rangle \\
&= |\phi(t)\rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dt_1\, g^+(t-t_1)\, V(t_1)\, |\phi(t_1)\rangle \\
&\quad + \int_{-\infty}^{\infty} dt_1\, dt_2\, g^+(t-t_1)\, V(t_1)\, g^+(t_1-t_2) \\
&\qquad V(t_2)\, |\phi(t_2)\rangle + \ldots
\end{aligned}$$

Sử dụng các hệ thức: (i) - (2.51), $|\phi(t)\rangle = i\,\tilde{g}(t-t_0)\,|\phi_n\rangle \equiv \exp(-i\,E_n\,(t-t_0))\,|\phi_n\rangle$; (ii) - (2.46), $g^+(\tau) = \theta(\tau)\,\tilde{g}(\tau)$; (iii) - (3.15), $|\psi(t)\rangle = S(t,\,t_0)\,\phi_n$, trong đó t_0 là thời điểm mà $V = 0$ với $t \leq t_0$, dễ dàng nhận được yếu tố ma trận:

$$\begin{aligned}\langle\phi_m|\,S(t,t_0)\,|\phi_n\rangle = \delta_{nm} + (-i)\int_{t_0}^{t} dt_1 e^{i\omega_{mn}t_1}\,\langle\phi_m|\,V(t_1)\,|\phi_n\rangle \\ +(-i)\int_{t_0}^{t} dt_1 dt_2 \int \frac{d\omega}{2\pi}\,e^{it_1(\omega_m-\omega)}e^{it_2(\omega-\omega_n)} \\ \langle\phi_m|\,V(t_1)\,g^+(\omega)\,V(t_2)\,|\phi_n\rangle + \ldots\end{aligned}$$

Ở đây, $\omega_n \equiv E_n\ \ (\hbar = 1)$; $\omega_{mn} = \omega_m - \omega_n$.
Nếu nhiễu loạn V không phụ thuộc thời gian, ta có thể bỏ các yếu tố ma trận ra ngoài tích phân. Chuyển các cận tích phân $t \to +\infty$, $t_0 \to -\infty$ (xem tiết 3.1), rồi lấy các tích phân theo thời gian. Kết quả cho:

$$\begin{aligned}\langle\phi_m|\,S\,|\phi_n\rangle &= \delta_{nm} - 2\pi\,i\delta(E_n - E_m)\,[\langle\phi_m|\,V\,|\phi_n\rangle + \\ &\quad \langle\phi_m|\,V\,g^+\,V\,|\phi_n\rangle + \ldots] \ .\end{aligned}$$

Trong biến đổi trên, ta đã sử dụng tích phân dạng

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(iEt) = 2\pi\delta(E) \ .$$

Để ý rằng biểu thức trong ngoặc vuông chính là $\langle\phi_m|\,T^+(E_n)\,|\phi_n\rangle$
Thành thử,

$$\langle\phi_m|\,S\,|\phi_n\rangle = \delta_{nm} - 2\pi\,i\delta(E_n - E_m)\,\langle\phi_m|\,T^+(E_n)\,|\phi_n\rangle \ .$$

Tương ứng, xác suất chuyển là:

$$\begin{aligned}|\langle\phi_m|\,S\,|\phi_n\rangle|^2 &= |\langle\phi_m|\,V\,|\phi_n\rangle|^2 \int dt_1 dt_2 e^{i\omega_{mn}(t_1-t_2)} + \ldots \\ &= |\langle\phi_m|\,V\,|\phi_n\rangle|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i\omega_{mn}t'} + \ldots \\ &= 2\pi\,|\langle\phi_m|\,V\,|\phi_n\rangle|^2\,\delta(E_n - E_m) \int_{-\infty}^{\infty} dt + \ldots\end{aligned}$$

Và, xác suất chuyển trong một đơn vị thời gian là:

$$\begin{aligned} W_{mn} &= 2\pi \left|\langle\phi_m| V |\phi_n\rangle\right|^2 \delta(E_n - E_m) + \ldots \\ &= 2\pi \left|\langle\phi_m| T^+(E_n) |\phi_n\rangle\right|^2 \delta(E_n - E_m) \ . \end{aligned} \quad (4.73)$$

Đây chính là quy tắc vàng Fermi (Fermi's Golden rule, ở đây $\hbar = 1$). So sánh hai dòng của hệ thức (4.73) ta thấy (dòng trên là số hạng bậc một cộng các số hạng tiếp theo), hóa ra việc tính đến các số hạng bậc cao trong biên độ xác suất chuyển có thể thực hiện một cách đơn giản bằng cách thay thế nhiễu loạn V ở số hạng bậc một (dòng trên) bằng $T^+(E_n)$ (dòng dưới).

B4.2 Chứng minh hệ thức

$$\begin{aligned} &\langle\phi_n| T^+(E_n) |\phi_l\rangle - \langle\phi_n| T^-(E_n) |\phi_l\rangle = \\ &\quad = -2\pi i \sum_m \langle\phi_n| T^-(E_n) |\phi_m\rangle \langle\phi_m| T^+(E_n) |\phi_l\rangle \, \delta(E_m - E_n) \ . \end{aligned} \quad (4.74)$$

B4.3 Với thế tương tác $V(t) = \sum_{q,k,k'} v_q C^+_{k+q}(t) C^+_{k'-q}(t) C_k(t) C_{k'}(t)$, quy ước mô tả mỗi yếu tố ma trận v_q bằng một đường sóng thẳng đứng, hãy vẽ tất cả các giản đồ liên kết không tương đương của chuỗi nhiễu loạn (4.63) cho đến số hạng bậc $n = 2$.
Trả lời: xem, chẳng hạn, Doniach and Sondheimer 1974, chương 6.

B4.4 Hãy viết rõ biểu thức của các năng lượng riêng $\Sigma^{(2a)}$, $\Sigma^{(2b)}$ và $\Sigma^{(2c)}$ tương ứng với các giản đồ (a), (b) và (c) trong hình 4.3.
Trả lời: xem, chẳng hạn, Mahan 2000, chương 2.

Chương 5

Hàm Green với Hamiltonian liên kết mạnh

Đối tượng nghiên cứu chính của cuốn sách này là các vật liệu cấu trúc mạng, có tính bất biến dịch chuyển. Hamiltonian mô tả các hệ này cũng có tính chất như vậy - Hamiltonian tuần hoàn. Các Hamiltonian tuần hoàn, như đã thảo luận trong tiết 1.3, cho phổ năng lượng liên tục với không chỉ ngưỡng dưới như ở hạt tự do (tiết 1.2) mà cả ngưỡng trên. Bức tranh cấu trúc vùng trở nên đối xứng hơn, tự nhiên hơn và cũng phong phú hơn về các đặc trưng vật lý. Các Hamiltonian này không chỉ rất hiệu quả trong nghiên cứu cấu trúc vùng của các mạng tinh thể lý tưởng, mà còn là cơ sở để nghiên cứu các mạng thực, trong đó luôn tồn tại các yếu tố không lý tưởng, có thể gần đúng xem là nhiễu loạn.

Ví dụ đơn giản nhất (và quan trọng) của Hamiltonian tuần hoàn chính là Hamiltonian của electron tự do trong tinh thể (tiết 1.3). Hàm sóng Bloch (1.14) có tính chất đối xứng tịnh tiến của mạng. Phổ trị riêng tương ứng gồm các vùng, tách biệt bởi các khe (gap), trong đó không có trạng thái nào (hình 1.1). Trong mỗi vùng (với chỉ số n) năng lượng $E_n\,(k)$ là liên tục, có cực tiểu hoặc cực đại tại các ngưỡng.

Chuyển động trong tinh thể, ngoài trường tuần hoàn của mạng, electron còn có thể chịu tác dụng của một trường lạ nào đó, chẳng hạn trường của nguyên tử hay ion tạp, dẫn đến xuất hiện các trạng thái liên kết, định xứ electron tại các vị trí hoặc năng lượng nhất định. Các trạng thái "liên kết mạnh" như vậy thường được mô tả bằng hàm Wannier (1.34). Hệ các hàm Wannier tạo thành một tập đầy đủ, nên có thể dùng làm cơ sở để biểu diễn các Hamiltonian hay toán tử nào đó trong các bài toán liên kết mạnh. Các năng lượng riêng ứng với các chỉ số n khác nhau ở hàm W_n (1.34) thường

tách biệt nhau một cách rõ rệt. Yếu tố ma trận của Hamiltonian giữa các trạng thái với n khác nhau là rất nhỏ: các hàm này phủ nhau không đáng kể. Khi l chạy khắp các nút mạng, phần không gian pha lan truyền của hàm $W_{n_i}(\mathbf{r}-\mathbf{a}_l)$ luôn tách biệt khỏi phần không gian của W_{n_j} với $n_j \neq n_i$. Mỗi chỉ số vùng n tương ứng với một không gian pha con. Thành thử, nếu chỉ giới hạn trong một không gian pha con, thì ta có thể bỏ qua chỉ số n và viết lại hàm Wannier dưới dạng một hàm nút:

$$W_n(\mathbf{r}-\mathbf{a}_l) \longrightarrow \langle r \mid l \rangle . \tag{5.1}$$

Khi đó, yếu tố ma trận của Hamiltonian trong không gian pha con này có dạng đơn giản

$$\langle l \mid \mathcal{H} \mid m \rangle = \varepsilon_l \, \delta_{lm} + V_{lm}, \tag{5.2}$$

với ε_l và V_{lm} tương ứng là các yếu tố chéo và không chéo ($V_{ll}=0$).

Tính tuần hoàn, tức là bất biến dịch chuyển của Hamiltonian, dẫn đến các hệ thức sau đối với các yếu tố chéo ε_l và không chéo V_{lm}:

$$\left.\begin{array}{lll} \varepsilon_l & \equiv \varepsilon_0 & \text{(với mọi l)} \\ V_{lm} & \equiv V_{l-m} & \text{(phụ thuộc chỉ } l-m) \end{array}\right\} . \tag{5.3}$$

Các hệ thức (5.2) và (5.3) là hệ quả của giả thiết về sự phủ nhau không đáng kể giữa các không gian pha con tương ứng với các chỉ số vùng khác nhau. Tất nhiên, đây là một gần đúng, một sự đơn giản hóa. Nhưng, quan trọng là, sự đơn giản hóa như vậy không ảnh hưởng đáng kể đến những đặc trưng vật lý quan trọng nhất của bài toán. Trong thực tế, sự phủ nhau của các vùng liên quan với các quỹ đạo nguyên tử tại các tâm khác nhau thường là rất yếu: các quỹ đạo liên kết mạnh với nguyên tử của mình! Tương ứng, Hamiltonian (5.2) cũng "liên kết mạnh" với một không gian pha con riêng biệt - một Hamiltonian liên kết mạnh.

5.1 Hamiltonian liên kết mạnh

Hamiltonian liên kết mạnh có dạng:

$$\mathcal{H} = \sum_j |j\rangle \, \varepsilon_j \, \langle j| + \sum_{i,j} |i\rangle \, V_{ij} \, \langle j| \ . \tag{5.4}$$

Ở đây, i, j là các chỉ số nút mạng; $|j\rangle$ là hàm nút $\langle r|j\rangle$ có tâm tại nút j và giảm nhanh khi đi ra xa. Tập các hàm nút được giả thiết là trực giao và đầy đủ. Với Hamiltonian tuần hoàn thì các yếu tố chéo ε_j và không chéo V_{ij} thỏa mãn (5.3).

Nói chung, các đại lượng $\{\varepsilon_j\}$ có thể tuân theo một phân bố nào đó. Đơn giản nhất là trường hợp tuần hoàn lý tưởng (5.3): $\varepsilon_j = \varepsilon_0$ với mọi j. Trường hợp đơn giản tiếp theo là xem mạng khảo sát như hai mang con (A và B) lồng vào nhau, mỗi nút của mạng con này có lân cận gần nhất là các nút của mạng con kia và mỗi mạng con đặc trưng bởi một giá trị của ε_j:

$$\varepsilon_j = \begin{cases} \varepsilon_a & \text{nếu } j \text{ thuộc mạng con A} \\ \varepsilon_b & \text{nếu } j \text{ thuộc mạng con B.} \end{cases} \tag{5.5}$$

Tuy nhiên, vì ta luôn có thể chọn ε_a hoặc ε_b làm gốc tính năng lượng, nên trong bài toán hai thành phần (5.5), thực ra chỉ còn một tham số $(\varepsilon_a - \varepsilon_b)$.

Trong mô hình Anderson (Anderson 1958) các năng lượng $\{\varepsilon_j\}$ thường được chọn ngẫu nhiên, tuân theo phân bố đều.

$$p(\varepsilon_j) = \begin{cases} 1/2W & , \text{nếu} \quad |\varepsilon_j| \le W \\ 0 & , \text{nếu} \quad |\varepsilon_j| > W. \end{cases} \tag{5.6}$$

Ở đây, W là tham số cơ bản của bài toán

Các yếu tố $\{V_{ij}\}$, nói chung, là khác không với mọi $j \neq i$ và phụ thuộc vào các tham số khác nhau, trong đó trước hết là khoảng cách $|j-i|$. Nhưng, trong thực tế, người ta thường sử dụng mô hình đơn giản, chỉ tính đến tương quan giữa các nút gần nhau nhất. Khi đó, vì khoảng cách giữa các nút lân cận gần nhất là như nhau trong toàn hệ, ta có

$$V_{i,j} = \begin{cases} V & , \text{nếu } i \text{ và } j \text{ là lân-cận gần nhất} \\ 0 & , \text{nếu không phải như trên.} \end{cases} \tag{5.7}$$

Như vậy, Hamiltonian liên kết mạnh (5.4) được đặc trưng bởi:
(1) Một cấu trúc mạng (vuông, lập phương đơn giản...),
(2) Tập các yếu tố chéo $\{\varepsilon_j\}$; tất cả được tính từ một gốc chung nào đó,
(3) Tập các yếu tố không chéo $\{V_{ij}\}$; thường dùng nhất là mô hình (5.7) với

V là âm. Thực ra, việc giải bài toán cho V âm hay dương là tương đương vì giữa hai hàm Green tương ứng có hệ thức đơn giản:

$$G(l,m;E+i\delta,\{\varepsilon_j\},V) = -G(l,m;-E-i\delta,\{-\varepsilon_j\},-V). \quad (5.8)$$

Với hệ tuần hoàn, các yếu tố chéo và không chéo thoả mãn hệ thức (5.3). Trong trường hợp này, bằng kiểm tra trực tiếp ta thấy Hamiltonian (5.4) có hàm riêng và trị riêng là:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{j}}\,|j\rangle, \quad (5.9)$$

$$E(k) = \varepsilon_0 + \sum_{l\neq 0} V_l\, e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}. \quad (5.10)$$

Hệ thức (5.10) có dạng (1.31). Nếu V_{ij} thỏa mãn (5.7), thì

$$E(k) = \varepsilon_0 + V\sum e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}, \quad (5.11)$$

trong đó tổng chỉ lấy theo các nút lân cận gần nhất. Số nút lân cận gần nhất Z (số toạ độ - coordinate number) phụ thuộc vào loại mạng. Xét ba mạng điển hình nhất:

Mạng một chiều, $Z = 2$:

$$E(k) = \varepsilon_0 + 2V\cos(ka); \quad (5.12)$$

Mạng vuông, $Z = 4$:

$$E(k) = \varepsilon_0 + 2V(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)); \quad (5.13)$$

Mạng lập phương đơn giản, $Z = 6$:

$$E(k) = \varepsilon_0 + 2V(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)). \quad (5.14)$$

Trong các biểu thức trên a là hằng số mạng. Biểu thức (5.14) trùng với kết quả đã biết (1.33). Khi vectơ sóng k thay đổi trong phạm vi vùng Brillouin thứ nhất, $-\pi/a < k_x\,(k_y,\,k_z) < \pi/a$, các hệ thức (5.12) - (5.14) mô tả một vùng phổ liên tục có tâm tại ε_0 và nửa độ rộng bằng ZV. Đây là một trong những kết luận quan trọng nhất rút ra từ mô hình liên kết mạnh tuần hoàn (5.4) và (5.7).

5.2 Các hàm Green

Mục đích của tiết này là tính các hàm Green của Hamiltonian liên kết mạnh cho ba trường hợp với các hệ thức tán sắc (5.12) - (5.14).

Theo (2.88),

$$G(\eta) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|}{\eta - E(k)} . \tag{5.15}$$

Tính hàm Green $G(\eta)$ có nghĩa là ta phải tính các yếu tố ma trận

$$\begin{aligned} G(\mathbf{l}, \mathbf{m}; \eta) &= \langle \mathbf{l}|G(\eta)|\mathbf{m}\rangle = \sum \frac{\langle \mathbf{l}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\mathbf{m}\rangle}{\eta - E(k)} \\ &= \frac{\Omega}{N(2\pi)^D} \int d\mathbf{k} \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{l}-\mathbf{m})}}{\eta - E(k)} , \end{aligned} \tag{5.16}$$

ở đây tích phân lấy trong vùng Brillouin thứ nhất; D là số chiều không gian (l là vị trí nút; $|\mathbf{l}\rangle$ là hàm nút như thường dùng ở trên).

Với các yếu tố chéo, $\mathbf{l} = \mathbf{m}$, (5.16) chuyển về dạng:

$$G(\mathbf{l}, \mathbf{l}; \eta) = \frac{\Omega}{N(2\pi)^D} \int \frac{d\mathbf{k}}{\eta - E(k)} . \tag{5.17}$$

Vì thể tích vùng Brillouin thứ nhất trong k-không-gian bằng $(2\pi)^D/\Omega_0$ với $\Omega_0 \equiv \Omega/N$, nên ta có dạng tiệm-cận của (5.17) là

$$G(\mathbf{l}, \mathbf{l}; \eta) = \xrightarrow[\eta \to \infty]{} \frac{1}{\eta} . \tag{5.18}$$

Dáng điệu này có thể nhận trực tiếp từ (5.17) hoặc bằng sử dụng hệ thức (2.23):

$$G(\mathbf{l}, \mathbf{l}; \eta) = \int dE \frac{\rho(E)}{\eta - E} \xrightarrow[\eta \to \infty]{} \frac{1}{\eta} \int dE \rho(E) .$$

với chú ý là đối với mật độ trạng thái $\rho(E)$ ta có $\int dE\rho(E) = 1$. Các yếu tố ma trận (5.16), (5.17) phụ thuộc vào quan hệ tán sắc $E(k)$. Ta sẽ tính các yếu tố ma trận này cho 3 trường hợp cụ thể của $E(k)$ tương ứng với (5.12)-(5.14).

5.2.1 Trường hợp 1 chiều

Thay (5.12) vào (5.16) có

$$\begin{aligned} G(l, m; \eta) &= \frac{L}{N\,2\pi}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \frac{e^{ika(l-m)}}{\eta - \varepsilon_0 - 2V\cos ka} \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi \frac{e^{i\varphi(l-m)}}{\eta - \varepsilon_0 - 2V\cos\varphi}, \end{aligned}$$

ở đây ta đã thay $(ka) = \varphi$, chiều dài hệ $L = Na$. Để ý thấy tích phân trên chỉ phụ thuộc vào hiệu $(l - m)$. Khi đó, bằng cách đặt $\omega = e^{i\varphi}$ ta chuyển được tích phân theo φ thành tích phân theo biến phức ω lấy trên đường tròn đơn vị:

$$G(l, m; \eta) = -\frac{1}{2\pi iV}.\oint d\omega \frac{\omega^{|l-m|}}{\omega^2 - 2\alpha\omega + 1}. \tag{5.19}$$

Ta đã đưa vào $\alpha = (\eta - \varepsilon_0)/B$ với $B \equiv 2V$ là nửa độ rộng vùng.

Phương trình bậc 2 ở mẫu số của (5.19) có hai nghiệm:

$$\omega_{1,2} = \alpha \mp \sqrt{\alpha^2 - 1}, \tag{5.20}$$

trong đó $\sqrt{\alpha^2 - 1}$ được lấy sao cho phần ảo của nó có cùng dấu với $\mathrm{Im}\{\alpha\}$. Vị trí tương đối của $\omega_{1,2}$ trong mặt phẳng phức phụ thuộc vào α. Có hai khả năng.

Một là, α không thỏa mãn đồng thời hai điều kiện, α là thực và $|\alpha| < 1$. Trong trường hợp này, ta có $|\omega_1| < 1$ (ω_1 ứng với dấu trừ trong (5.20)), còn $|\omega_2| > 1$, trong khi $\omega_1.\omega_2 = 1$. Như vậy, trong hai cực điểm của (5.19) thì ω_1 nằm bên trong và ω_2 nằm bên ngoài vòng tròn đơn vị. Do đó, tích phân này có thể dễ dàng tính bằng phương pháp thặng dư:

$$\begin{aligned} G(l, m; \eta) &= -\frac{1}{2\pi iV} 2\pi i \left(\frac{\omega^{|l-m|}}{2\omega - 2\alpha}\right)_{\omega_1} \\ &= -\frac{1}{V}\frac{\omega_1^{|l-m|}}{\omega_1 - \omega_2} = \frac{1}{\sqrt{(\eta - \varepsilon_0)^2 - B^2}}\,\omega_1^{|l-m|}, \end{aligned} \tag{5.21}$$

với $|\omega_1| < 1$.

Hai là, α là thực và $|\alpha| < 1$. Trong trường hợp này cả hai cực $\omega_{1,2}$ đều nằm

ngay trên đường tròn lấy tích phân. Tích phân (5.19) không còn xác định tốt nữa, và ta phải xét các hàm giới hạn:

$$G^{\pm}(l, m; E) = \frac{\mp \imath}{\sqrt{B^2 - (E - \varepsilon_0)^2}} \left(\alpha \mp \imath \sqrt{1 - \alpha^2}\right)^{|l-m|} . \qquad (5.22)$$

Ở đây, $-B < E - \varepsilon_0 < B$ và $\sqrt{1 - \alpha^2}$ lấy dấu cộng. Như vậy, với α thực và $|\alpha| < 1$ ta có một vùng phổ liên tục, trải từ $\varepsilon_0 - B$ đến $\varepsilon_0 + B$ như đã ghi nhận ở (5.12).

Sử dụng (5.22) và (2.93), ta tính được mật độ trạng thái tính trên một nút mạng:

$$\rho(E) = \mp \frac{1}{\pi} \mathrm{Im}\{G^{\pm}(l, l; E)\} = \frac{\theta(B - |E - \varepsilon_0|)}{\pi \sqrt{B^2 - (E - \varepsilon_0)^2}} . \qquad (5.23)$$

Các kết quả (5.22) và (5.23) được mô tả bằng đồ thị trên hình 5.1. Ta thấy, ở cả hai ngưỡng vùng, $(E - \varepsilon_0)/B = \pm 1$, hàm Green cũng như mật độ trạng thái (tỷ lệ với $\mathrm{Im}\{G^{\pm}(l, l; E)\}$ mô tả bằng đường đứt nét) đều có phân kỳ dạng $\sim 1/\sqrt{E}$, dáng điệu đặc trưng của hệ một chiều.

Ngoài ra, từ (5.21) và (5.22) rõ ràng là, với η không thuộc vùng phổ liên tục các yếu tố không chéo ($l \neq m$) của hàm Green (5.21) với $|\omega_1| < 1$ giảm nhanh (dạng e-mũ) theo khoảng cách $|l - m|$, trong khi với $\eta = E$ thuộc vùng phổ liên tục, thì vì $|\omega_1| = 1$ nên các yếu tố ma trận không giảm khi tăng $|l - m|$.

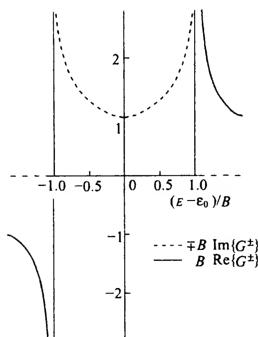
5.2.2 Mạng vuông

Đặt $E(k)$ (5.13) vào yếu tố ma trận (5.16), ta có

$$G(\mathbf{l}, \mathbf{m}; E) = \frac{a^2}{(2\pi)^2} \int d^2k \, \frac{\exp(i\mathbf{k}(\mathbf{l} - \mathbf{m}))}{\eta - \varepsilon_0 - 2V(\cos k_x a + \cos k_y a)} .$$

Để đánh giá tích phân trên, ta viết lại số mũ ở tử số:

$$\mathbf{k}(\mathbf{l} - \mathbf{m}) = [k_1(l_1 - m_1) + k_2(l_2 - m_2)]\, a$$



Hình 5.1: Yếu tố chéo $G^{\pm}(E)$ biểu diễn theo E cho mạng 1 chiều. Chú ý, $\rho(E)$ tỷ lệ với $\mathrm{Im}\{G^{\pm}\}$ mô tả bằng đường đứt nét (minh họa).

Ở đây, để gọn, ta dùng chỉ số $1(2)$ thay cho $x(y)$:

$$-\pi/a < k_1\,(k_2) < \pi/a\,.$$

Tương tự như trường hợp mạng 1 chiều, đặt $k_1 a = \varphi_1$ và $k_2 a = \varphi_2$. Biểu thức hàm Green ở trên chuyển về dạng

$$\begin{aligned}
&G\,(\mathrm{l},\mathrm{m};\,\eta) = \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_2 \frac{\exp\left[i\varphi_1\,(l_1 - m_1) + i\varphi_2\,(l_2 - m_2)\right]}{\eta - \varepsilon_0 - 2V\,(\cos\varphi_1 + \cos\varphi_2)}\,. \\
&= \frac{1}{\pi^2}\int_0^{\pi} d\varphi_1 \int_0^{\pi} d\varphi_2 \frac{\left[\cos\varphi_1\,(l_1 - m_1)\right]\left[\cos\varphi_2\,(l_2 - m_2)\right]}{\eta - \varepsilon_0 - 2V\,(\cos\varphi_1 + \cos\varphi_2)} \\
&= \frac{1}{\pi^2}\int_0^{\pi} d\varphi_1 \int_0^{\pi} d\varphi_2 \left[\cos\,(l_1 - m_1 + l_2 - m_2)\,\varphi_1\right]. \\
&\qquad \frac{\left[\cos\,(l_1 - m_1 - l_2 + m_2)\,\varphi_2\right]}{\eta - \varepsilon_0 - 4V\cos\varphi_1\cos\varphi_2}\,.
\end{aligned} \tag{5.24}$$

Bước cuối cùng trong biến đổi trên được chỉ ra chi tiết trong bài báo của Morita (Morita 1971). Tích phân (5.24) không thể lấy hiển thị cho (l, m) bất

kỳ. Morita (Morita 1971) đề xuất các hệ thức truy chứng cho phép: (i) biểu diễn $G\left(\mathrm{l}, \mathrm{m};\ \eta\right)$ với (l, m) bất kỳ qua $G\left(\mathrm{l}, \mathrm{m};\ \eta\right)$ với $l_1 - m_1 = l_2 - m_2$ và (ii) biểu diễn $G\left(\mathrm{l}, \mathrm{m};\ \eta\right)$ với $l_1 - m_1 = l_2 - m_2$ bất kỳ qua $G\left(\mathrm{l}, \mathrm{l};\ \eta\right)$ và $G\left(\mathrm{l}, \mathrm{m};\ \eta\right)$ với $l_1 - m_1 = l_2 - m_2 = 1$ (ta sẽ gọi hàm này là $G\left(1;\ \eta\right)$). Như vậy, việc tính (5.24) quy về tính $G\left(\mathrm{l}, \mathrm{l};\ \eta\right)$ và $G\left(1;\ \eta\right)$. Ở đây, ta sẽ không đi sâu vào các hệ thức truy chứng, mà chỉ dừng lại ở bước cuối cùng.

Các yếu tố chéo của (5.24) là:

$$
\begin{aligned}
G\left(1, 1;\ \eta\right) &= \frac{1}{\left(2\pi\right)^2}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_2 \frac{1}{\eta - \varepsilon_0 - B\cos\varphi_1\cos\varphi_2} \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_1 \frac{1}{\left[\left(\eta - \varepsilon_0\right)^2 - B^2\cos^2\varphi_1\right]^{1/2}} \\
&= \frac{1}{\pi\left(\eta - \varepsilon_0\right)}\int_0^{\pi} \frac{d\varphi}{\left[1 - \lambda^2\cos^2\varphi\right]^{1/2}} \\
&= \frac{2}{\pi\left(\eta - \varepsilon_0\right)}\mathcal{K}\left(\lambda\right). \qquad (5.25)
\end{aligned}
$$

trong đó $\lambda = B/\left(\eta - \varepsilon_0\right)$; $\mathcal{K}$ là tích phân elliptic đầy đủ loại 1.

Hàm $G\left(1; \eta\right)$ nhận được bằng thay vào (5.24) $l_1 - m_1 = l_2 - m_2 = 1$:

$$
\begin{aligned}
G\left(1;\ \eta\right) &= \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} d\varphi_1 \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_2 \frac{\cos 2\varphi_1}{\eta - \varepsilon_0 - B\cos\varphi_1\cos\varphi_2} \\
&= \frac{1}{\pi}\int d\varphi_1 \frac{\cos 2\varphi_1}{\left[\left(\eta - \varepsilon_0\right)^2 - B^2\cos^2\varphi_1\right]^2} \\
&= \frac{2}{\pi\left(\eta - \varepsilon_0\right)}\left[\left(\frac{2}{\lambda^2} - 1\right)\mathcal{K}\left(\lambda\right) - \frac{2}{\lambda^2}\mathcal{E}\left(\lambda\right)\right], \qquad (5.26)
\end{aligned}
$$

trong đó $\mathcal{E}\left(\lambda\right)$ là tích phân elliptic toàn phần loại 2 (về các tích phân elliptic, xem trong Abramowitz and Stegun 1965 hay Morita 1971). Về nguyên tắc, từ (5.25) và (5.26), như giới thiệu ở trên, ta có thể tính các yếu tố $G\left(\mathrm{l}, \mathrm{m};\ \eta\right)$ bất kỳ.

Chuyển sang xét các hàm giới hạn $G^{\pm}\left(E\right)$ với E trùng với phổ liên tục. Với $\eta = E + i\delta$, $\delta \rightarrow 0_+$, bằng thác triển giải tích $\mathcal{K}\left(\lambda\right)$ và $\mathcal{E}\left(\lambda\right)$, từ (5.25) và (5.26), ta có thể nhận trực tiếp các hàm $G^{\pm}\left(1, 1;\ E\right)$ và $G^{\pm}\left(1;\ E\right)$ (xem

Morita 1971). Chẳng hạn, với $G^{\pm}(1,1;E)$ ta được:

$$\mathrm{Re}\{G^{\pm}(1,1;E)\} = \begin{cases} -\frac{2}{\pi B}\mathcal{K}\left(\frac{E-\varepsilon_0}{B}\right) & ; -4V < E-\varepsilon_0 < 0 \\ \frac{2}{\pi B}\mathcal{K}\left(\frac{E-\varepsilon_0}{B}\right) & ; 0 < E-\varepsilon_0 < 4V \end{cases} \qquad (5.27)$$

$$\mathrm{Im}\{G^{\pm}(1,1;E)\} = \mp\frac{2}{\pi B}\mathcal{K}\left(\sqrt{1-(E-\varepsilon_0)^2/B^2}\right), \quad |E-\varepsilon_0| < 4V. \qquad (5.28)$$

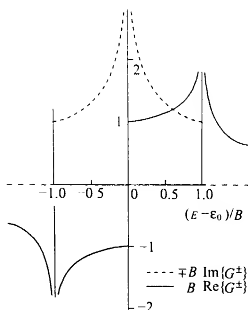
Từ đây suy ra tiếp mật độ trạng thái trên một nút.

$$\begin{aligned}\rho(E) &= \mp\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\{G^{\pm}(1,1;E)\} \\ &= \frac{2}{\pi^2 B}\,\theta(B-|E-\varepsilon_0|)\,\mathcal{K}\left(\sqrt{1-(E-\varepsilon_0)^2/B^2}\right).\end{aligned} \qquad (5.29)$$

Các kết quả (5.27) - (5.29) được mô tả bằng đồ thị trên hình 5.2. Ở cả hai ngưỡng vùng $\mathrm{Re}\{G^{\pm}\}$ có kỳ dị logarit, đặc thù của hệ hai chiều. Mật độ trạng thái $\rho(E)$ (tỷ lệ với $\mathrm{Im}\{G^{\pm}\}$, mô tả bằng đường đứt nét) gián đoạn ở cả hai ngưỡng. Ngoài ra, như thấy rõ trên hình, hàm Green còn có kỳ dị ngay cả ở điểm $E = \varepsilon_0$ bên trong vùng, tại đó $\mathrm{Re}\{G^{\pm}\}$ không liên tục, còn $\mathrm{Im}\{G^{\pm}\}$ (và do đó $\rho(E)$) có kỳ dị logarit. Điểm kỳ dị loại này gọi là kỳ dị van Hove. Nó liên quan với các điểm yên ngựa ở hàm $E(k)$. Số điểm kỳ dị như thế phụ thuộc vào số biến độc lập k_i (xem van Hove 1953).

Các đặc trưng cơ bản của hình 5.2 cũng quan sát được ở hàm Green tính cho các mạng 2 chiều khác. Horiguchi (Horiguchi 1972) đã tính hàm Green liên kết mạnh cho mạng tam giác và mạng tổ ong. Trong cả hai trường hợp hàm Green đều có thể biểu diễn qua các tích phân elliptic đầy đủ loại 1 và loại 2 với các đặc trưng cơ bản như trên hình 5.2, kể cả kỳ dị van Hove.

Bởi vì với các mạng hai chiều, biểu thức của các hàm Green thường rất phức tạp. Trong trường hợp, nếu ta không quan tâm tới các chi tiết định lượng, thì có thể gần đúng hàm Green bằng các biểu thức đơn giản. Chẳng



Hình 5.2: Yếu-tố chéo $G^{\pm}\,(1,1;\,E)$ biểu diễn theo E cho mạng vuông. Chú ý, $\rho\,(E)$ tỷ lệ với $\mathrm{Im}\{G^{\pm}\}$ mô tả bằng đường đứt nét (minh-họa)

hạn, với mạng vuông, biểu thức gần đúng thường dùng có dạng:

$$G\,(1,1;\,\eta) = \frac{1}{2B}\ln\frac{\eta - \varepsilon_0 + B}{\eta - \varepsilon_0 - B}\,. \tag{5.30}$$

Hàm này có dáng điệu đúng ở ngưỡng vùng và cho mật độ trạng thái trên một nút:

$$\rho\,(E) = \frac{1}{2B}\,\theta\,(B - |E - \varepsilon_0|)\,. \tag{5.31}$$

Nhưng hàm (5.30) không dẫn đến kỳ dị van Hove bên trong vùng. Sau này, biểu thức (5.30) sẽ được sử dụng khi ta chỉ quan tâm đến miền lân cận các ngưỡng vùng.

5.2.3 Mạng lập phương đơn giản

Đặt $E\,(k)$ ở biểu thức (5.14) vào biểu thức (5.16), biến đổi tương tự như trường hợp mạng vuông, ta nhận được yếu tố ma trận của hàm Green liên

kết mạnh trong mạng lập phương đơn giản:

$$G(\mathbf{l},\mathbf{m};\eta) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_2 \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3 \frac{\cos\left[(l_1-m_1)\varphi_1+(l_2-m_2)\varphi_2+(l_3-m_3)\varphi_3\right]}{\eta-\varepsilon_0-2V(\cos\varphi_1+\cos\varphi_2+\cos\varphi_3)}.$$

Ở đây, $\varphi_i = k_i a$ với $-\pi/a < k_i < \pi/a$ $(i = 1, 2, 3)$.

Ta bắt đầu bằng các yếu tố chéo

$$G(\mathbf{l},\mathbf{l};\eta) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_2 \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3 \frac{1}{\eta-\varepsilon_0-2V(\cos\varphi_1+\cos\varphi_2+\cos\varphi_3)}. \quad (5.32)$$

Bằng cách lấy tích phân theo φ_2 và φ_3, tương tự như khi dẫn ra (5.25), ta có

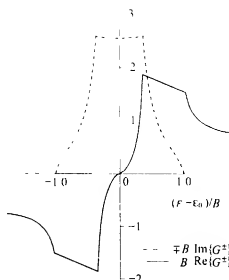
$$G(\mathbf{l},\mathbf{l};\eta) = \frac{1}{2\pi^2 V}\int_0^{\pi} d\varphi_1\, \lambda\, \mathcal{K}(\lambda), \quad (5.33)$$

ở-đây

$$\lambda = 4V/(\eta-\varepsilon_0-2V\cos\varphi_1). \quad (5.34)$$

Tích phân (5.33) có thể tính số. Kết quả tính số $\mathrm{Re}\{G^{\pm}(\mathbf{l},\mathbf{l};E)\}$ và $\mathrm{Im}\{G^{\pm}(\mathbf{l},\mathbf{l};E)\}$ cho miền E thực được mô tả trên hình 5.3. Ta nhận được một dáng điệu điển hình của hệ ba chiều: ở cả hai ngưỡng mật độ trạng thái $\propto \mathrm{Im}\{G^{\pm}\}$ (đường đứt nét) dần liên tục đến không theo quy luật $\sqrt{|\Delta E|}$, trong đó $|\Delta E|$ là khoảng cách từ năng lượng E tới ngưỡng vùng.
Tại ngưỡng vùng $\mathrm{Re}\{G^{\pm}\}$ vẫn là hữu hạn, mặc dù đạo hàm của nó tăng vô hạn khi ta dần đến ngưỡng vùng từ phía ngoài. Bên trong vùng có hai kỳ dị van Hove, tại đó cả $\mathrm{Im}\{G^{\pm}\}$ và $\mathrm{Re}\{G^{\pm}\}$ đều liên tục nhưng đạo hàm của chúng là gián đoạn và tăng rất cao.

Việc tính các yếu tố không chéo $G(\mathbf{l},\mathbf{m};\eta)$ không thể làm trực tiếp, mà phải từng bước thông qua các hệ thức truy chứng tương tự như trường hợp mạng vuông. Tính toán thường bắt đầu bằng các yếu tố chéo (5.33) và các yếu tố $G(\mathbf{l},\mathbf{m};\eta)$ với $(\mathbf{l}-\mathbf{m})$ nằm dọc theo các trục của mạng:



Hình 5.3: Yếu tố chéo $G^{\pm}(l,\ l;\ E)$ biểu diễn theo E cho mạng lập phương đơn giản. Chú ý, $\rho(E)$ tỷ lệ với $\mathrm{Im}\{G^{\pm}\}$ mô tả bằng đường đứt nét (minh họa).

$\mathbf{l}-\mathbf{m}=l_i-m_i$. Với trường hợp này, tích phân phải tính có dạng giống như ở mạng vuông. Chẳng hạn, với $\mathbf{l}-\mathbf{m}=l_1-m_1$, ta có

$$G(l_1-m_1,\ 0.\ 0;\ \eta)=\frac{1}{2\pi^2V}\int_0^{\pi}d\varphi_1\,\cos(l_1-m_1)\,\varphi_1\,\lambda\,\mathcal{K}(\lambda)\,.$$

Các hàm $G(0,\ l_2-m_2,\ 0;\ \eta)$ và $G(0.\ 0,\ l_3-m_3;\ \eta)$ cũng có dạng tương tự. Horiguchi (Horiguchi 1971) đã đề xuất các hệ thức truy chứng cho phép tính $G(\mathbf{l},\mathbf{m};\ \eta)$, với $|\mathbf{l}-\mathbf{m}|$ nhỏ, qua $G(l_1-m_1,\ 0,\ 0;\ \eta)$. Morita (Morita 1975) chỉ ra rằng, tất cả các yếu tố $G(\mathbf{l},\mathbf{m};\ \eta)$ đều có thể tính qua $G(\mathbf{l},\ \mathbf{l};\ \eta)$, $G(2,\ 0,\ 0;\ \eta)$ và $G(3,\ 0,\ 0;\ \eta)$. Callaway (Callaway 1964) đã nhận được dạng tiệm-cận đúng của $G(\mathbf{l},\mathbf{m};\ \eta)$: bên trong vùng, $G(\mathbf{l},\mathbf{m})$ giảm như $\propto|\mathbf{l}-\mathbf{m}|^{-1}$, còn bên ngoài vùng, nó giảm nhanh theo hàm e-mũ.

Với hệ ba chiều, ngoài mạng lập phương đơn giản, hàm Green liên kết mạnh còn được tính cho các mạng khác, trong đó quan trọng nhất là mạng lập phương tâm mặt và lập phương tâm khối. Kết quả nhận được đối với hai loại mạng này có những điểm khác về định tính đối với mạng lập phương đơn giản và không quen thuộc với các hệ ba chiều nói chung. Chẳng hạn, hàm Green có thể tăng vô hạn ở ngưỡng dưới và cả ở bên trong vùng.

Việc tính số các hàm Green cho các mạng ba chiều là rất phức tạp, nhưng không phải khi nào cũng cần thiết. Trong thực tế, nếu không quan tâm đến

các chi tiết định lượng, ta có thể dùng các biểu thức gần đúng của G. Các biểu thức này phải phản ánh được những đặc trưng điển hình của hàm Green trong mạng ba chiều, phải có dáng điệu giải tích đúng ở lân cận các ngưỡng vùng. Một trong những biểu thức gần đúng được sử dụng rộng rãi là hàm Green Hubbard:

$$G(1,1;\eta) = \frac{2}{\eta - \varepsilon_0 + \sqrt{(\eta - \varepsilon_0)^2 - B^2}}. \tag{5.35}$$

Khi lấy căn, dấu của $\mathrm{Im}\sqrt{(\eta - \varepsilon_0)^2 - B^2}$ được chọn sao cho giống như dấu của $\mathrm{Im}\{\eta\}$. Mật độ trạng thái tương ứng với hàm Green (5.35) là:

$$\rho(E) = \frac{2\theta(B - |E - \varepsilon_0|)}{\pi B^2}\sqrt{B^2 - (E - \varepsilon_0)^2}. \tag{5.36}$$

5.3 Khai triển nhiễu loạn tái chuẩn hóa và hàm Green trong mạng Bethe

5.3.1 Khai triển nhiễu loạn tái chuẩn hóa

Hamiltonian liên kết mạnh (5.4) có thể viết dưới dạng $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$, trong đó

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= \sum_l |\mathbf{l}\rangle\, \varepsilon_l \,\langle \mathbf{l}|, \\ \mathcal{H}_1 &= V \sum_{<l,m>} |\mathbf{l}\rangle \langle \mathbf{m}|. \end{aligned} \tag{5.37}$$

Ở đây, chỉ tính đến tương quan giữa các nút lân cận gần nhất dạng (5.7). Nếu xem $\mathcal{H}_1$ là nhiễu loạn, thì hàm Green của Hamiltonian toàn phần $\mathcal{H}$ có thể xác định qua hàm Green không nhiễu loạn G_0 và toán tử nhiễu loạn $\mathcal{H}_1$ theo hệ thức (4.3):

$$G = G_0 + G_0\mathcal{H}_1G_0 + G_0\mathcal{H}_1G_0\mathcal{H}_1G_0 + \dots$$

Hay, với yếu tố ma trận bất kỳ

$$\begin{aligned} G(\mathrm{l}, \mathrm{m}) &= G_0(\mathrm{l}, \mathrm{m}) + \sum_{n_1 n_2} G_0(\mathrm{l}, \mathrm{n}_1) \langle \mathrm{n}_1 | \mathcal{H}_1 | \mathrm{n}_2 \rangle \, G_0(\mathrm{n}_2, \mathrm{m}) + \\ &+ \sum_{n_1 \ldots n_4} G_0(\mathrm{l}, \mathrm{n}_1) \langle \mathrm{n}_1 | \mathcal{H}_1 | \mathrm{n}_2 \rangle \\ &\qquad G_0(\mathrm{n}_2, \mathrm{n}_3) \langle \mathrm{n}_3 | \mathcal{H}_1 | \mathrm{n}_4 \rangle \, G_0(\mathrm{n}_4, \mathrm{m}) + \ldots \end{aligned} \tag{5.38}$$

Với $\mathcal{H}_0$ dạng (5.37) hàm Green không nhiễu loạn thỏa mãn hệ thức

$$G_0(\mathrm{n}_1, \mathrm{n}_2) = \delta_{\mathrm{n}_1, \mathrm{n}_2} G_0(\mathrm{n}_1) \ , \tag{5.39}$$

trong đó

$$G_0(\mathrm{n}) = [\eta - \varepsilon_n]^{-1} \, . \tag{5.40}$$

Đồng thời, theo (5.37) thì $\langle \mathrm{n}_1 | \mathcal{H} | \mathrm{n}_2 \rangle$ chỉ khác không (và bằng V) khi n_1 và n_2 là lân cận gần nhất của nhau. Do đó ta có thể viết lại (5.38) dưới dạng:

$$\begin{aligned} G(\mathrm{l}, \mathrm{m}) &= \delta_{lm} G_0(\mathrm{l}) + G_0(\mathrm{l}) V G_0(\mathrm{m}) \delta_{l, m+1} + \\ &+ \sum_{n_1} G_0(\mathrm{l}) V G_0(\mathrm{n}_1) V G_0(\mathrm{m}) + \ldots \end{aligned} \tag{5.41}$$

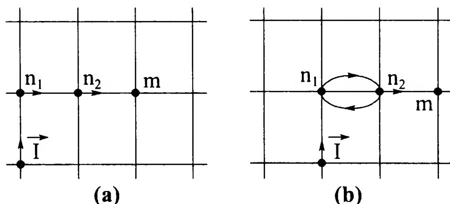
Tổng (5.41) có thể giải thích một cách hình học như sau: Mỗi số hạng trong tổng này cho tương ứng với một con đường xuất phát từ l đi tới m, mỗi bước nối một nút với một lân cận gần nhất của nó. Rõ ràng là, có sự tương ứng một một giữa các con đường như vậy và các số hạng của chuỗi (5.41). Và, do đó, $G(\mathrm{l}, \mathrm{m})$ có thể tính bằng tổng các đóng góp từ tất cả các con đường có thể đi từ l đến m. Mỗi số hạng của (5.41) nhận được trực tiếp từ con đường tương ứng bằng cách: (i) mỗi nút n mà con đường đi qua, kể cả l và m, cho đóng góp một nhân tử $G_0(\mathrm{n})$; (ii) mỗi bước từ một nút tới nút lân cận gần nhất của nó cho đóng góp một nhân tử V. Chẳng hạn, các số hạng tương ứng với các con đường trên hình 5.4a và 5.4b là:

$$G_0(\mathrm{l}) V G_0(\mathrm{n}_1) V G_0(\mathrm{n}_2) V G_0(\mathrm{m})$$

và

$$G_0(\mathrm{l}) V G_0(\mathrm{n}_1) V G_0(\mathrm{n}_2) V G_0(\mathrm{n}_1) V G_0(\mathrm{n}_2) V G_0(\mathrm{m}) \ .$$

Chú ý là trên con đường ở hình 5.4b có sự lặp lại ở hai nút n_1 và n_2: $l \to n_1 \to n_2 \to n_1 \to n_2 \to m$. Nói chung, ta thấy cấu trúc tôpô của các con đường có thể chia làm hai loại: các đường xương sống (không tự cắt mình) và các đường lặp. Đường xương sống là đường đơn, trên đó không nút nào được thăm viếng quá một lần (hình 5.4a). Đường trên hình 5.4b là đường lặp, có một bước lặp tại n_1 : $n_1 \to n_2 \to n_1$. Tất nhiên, một cách tương đương, có thể xem đây là bước lặp tại nút n_2: $n_2 \to n_1 \to n_2$. Trong tính toán ta phải chú ý điều này để không tính các bước lặp hai lần.



Hình 5.4:

Rõ ràng là, họ tất cả các con đường, mà chúng chỉ khác nhau bởi các đường lặp tại nút l, sẽ cho đóng góp tổng cộng là:

$$VG_0\,(\mathbf{n}_1)\ldots VG_0\,(\mathbf{m})\sum_l\ ,$$

trong đó ta ký hiệu $\sum_l$ là tổng đóng góp của tất cả các đường lặp ở nút l, tức là các đường đi từ l và quay lại chính nút đó. Tổng này không phải gì khác, mà chính là $G\,(1,\,1)$. Thành thử, đóng góp của tất cả các vòng lặp tại l vào mỗi số hạng trong tổng (5.41) dẫn đến sự thay thế đơn giản nhân tử $G_0\,(1)$ ở phía trái bằng $G\,(1,\,1)$. Tương tự, ở nút tiếp theo $\mathbf{n}_1$, tổng theo tất cả các vòng lặp tại đó dẫn đến việc thay thừa số $G_0\,(\mathbf{n}_1)$ bằng $G\,(\mathbf{n}_1,\,\mathbf{n}_1\,[1])$. Ở đây, ta đưa vào ký hiệu $\mathbf{n}_1\,[1]$, ngụ ý trừ đi các vòng lặp tại $\mathbf{n}_1$ mà có đi qua l (đã được tính trong $G\,(1,\,1)$). Để ý dạng hàm G_0 (5.40), ta nhận thấy, việc loại các đường lặp đi qua l tương đương với việc cho $\varepsilon_l = \infty$. Như vậy $G\,(\mathbf{n}_1,\,\mathbf{n}_1\,[1])$ cần được hiểu là yếu tố ma trận $G\,(\mathbf{n}_1,\,\mathbf{n}_1)$ với $\varepsilon_l = \infty$.

Quá trình thay thế như trên có thể tiếp diễn với các nút tiếp theo: $G_0(\mathrm{n}_2) \rightarrow G_0(\mathrm{n}_2, \mathrm{n}_2[\mathrm{l}, \mathrm{n}_1])\ldots$ Sau khi thay thế toàn bộ, ta sẽ không còn vướng mắc gì với các đường lặp nữa và (5.41) trở thành:

$$
\begin{aligned}
G(\mathrm{l}, \mathrm{m}) \;=\; & \sum G(\mathrm{l}, \mathrm{l})\, VG(\mathrm{n}_1, \mathrm{n}_1[\mathrm{l}])\, VG(\mathrm{n}_2, \mathrm{n}_2[\mathrm{l}, \mathrm{n}_1])\, V \\
& \ldots VG(\mathrm{m}, \mathrm{m}[\mathrm{l}, \mathrm{n}_1 \ldots]) \,. \qquad (5.42)
\end{aligned}
$$

Quan trọng là, bây giờ tổng chỉ còn đơn giản lấy theo các đường xương sống đi từ l tới m: $\mathrm{l} \rightarrow \mathrm{n}_1 \rightarrow \mathrm{n}_2 \rightarrow \ldots \rightarrow \mathrm{m}$.

Yếu-tố chéo của (5.42) là

$$
G(\mathrm{l}, \mathrm{l}) = G_0(\mathrm{l}) + \sum G(\mathrm{l}, \mathrm{l})\, VG(\mathrm{n}_1, \mathrm{n}_1[\mathrm{l}])\, V \ldots G_0(\mathrm{l}) \,. \qquad (5.43)
$$

Ở đây, chú ý là, nhân tử cuối cùng ở (5.42) với $\mathrm{m} = \mathrm{l}$ (chéo), sau khi loại tất cả các đường lặp ở $\mathrm{m} = \mathrm{l}$ thì còn lại chỉ là $G_0(\mathrm{l})$, như ở (5.43) (các đường vòng đã được tính đủ ở nhân tử đầu tiên $G(\mathrm{l}, \mathrm{l})$). Tổng trong (5.43) được lấy theo tất cả các đường xương sống khép kín ($\mathrm{l} \rightarrow \mathrm{m} = \mathrm{l}$). Biểu thức này có thể viết dưới dạng:

$$
G(\mathrm{l}, \mathrm{l}) = G_0(\mathrm{l}) + G(\mathrm{l}, \mathrm{l})\, \Delta(\mathrm{l})\, G_0(\mathrm{l}) \qquad (5.44)
$$

với

$$
\Delta(\mathrm{l}) = \sum VG(\mathrm{n}_1, \mathrm{n}_1[\mathrm{l}])\, V \ldots V. \qquad (5.45)
$$

Phương trình (5.44) xác định các yếu tố chéo của hàm Green theo $\Delta(\mathrm{l})$:

$$
G(\mathrm{l}, \mathrm{l}; \eta) = \frac{G_0(\mathrm{l})}{1 - G_0(\mathrm{l})\, \Delta(\mathrm{l}; \eta)} \equiv \frac{1}{\eta - \varepsilon_l - \Delta(\mathrm{l}; \eta)} \,. \qquad (5.46)
$$

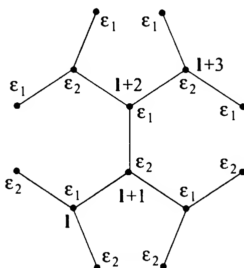
Trong hệ thức cuối cùng này, rõ ràng $\Delta(\mathrm{l})$ có ý nghĩa của năng lượng và thường được gọi là năng lượng riêng (self energy).

Các biểu thức nhận được (5.44) - (5.46) được gọi là khai triển nhiễu loạn tái chuẩn hóa của hàm Green. Đặc trưng của khai triển này là: cho tương ứng một một giữa các số hạng trong chuỗi nhiễu loạn và các đường xương sống trong mạng khảo sát. Điều này làm đơn giản việc lấy tổng. Cái giá phải trả cho sự đơn giản ấy là các hàm $G_0(\mathrm{n})$ tại các nút phải thay bằng các

hàm phức tạp hơn, dạng $G(\mathrm{n}, \mathrm{n}[\mathrm{l} \ldots])$. Tuy nhiên, việc tính các hàm này lại có thể thực hiện bằng khai triển nhiễu loạn tái chuẩn hóa. Kết quả là, ta phải thực hiện một quá trình tính lặp. Nếu số nút trong mạng là hữu hạn thì số bước lặp cũng hữu hạn vì mỗi bước một nút được đưa vào tính toán. Với mạng vô hạn thì cần thảo luận cụ thể khả năng hội tụ của phép tính.

5.3.2 Hàm Green cho mạng Bethe

Mạng Bethe (hay cây Cayley - Cayley tree) là mạng không có những vòng kín và đặc trưng hoàn toàn chỉ bởi số lân cận gần nhất Z. Trên hình 5.5 vẽ một phần mạng Bethe với $Z = 3$, trong đó các năng lượng nút ε_l nhận hai giá trị ε_1 hoặc ε_2, xen kẽ nhau. Việc tính hàm Green cho mạng Bethe có thể dễ dàng thực hiện bằng sử dụng khai triển nhiễu loạn tái chuẩn hóa.



Hình 5.5: Mạng Bethe (Cayley tree), $Z = 3$

Do cấu trúc đặc thù, trong mạng Bethe tại mỗi nút xuất phát l chỉ có $K + 1 = Z$ con đường quay trở lại nút đó. Thành ra, năng lượng riêng (5.45) có dạng đơn giản

$$\Delta(\mathrm{l}) = (K+1)\, V^2 G(\mathrm{l}+1, \mathrm{l}+1\,[\mathrm{l}])\,. \tag{5.47}$$

Mặt khác, theo (5.46), ta cũng có

$$G(\mathrm{l}+1, \mathrm{l}+1\,[\mathrm{l}]) = \frac{1}{\eta - \varepsilon_{l+1} - \Delta(\mathrm{l}+1\,[\mathrm{l}])}\,. \tag{5.48}$$

Đại lượng $\Delta(1+1[1])$ lại có thể biểu diễn tiếp dưới dạng, tương tự như (5.47):

$$\Delta(1+1[1]) = KV^2G(1+2, 1+2[1+1]) . \quad (5.49)$$

Điều cần lưu ý ở đây là, trong (5.49) nhân tử phía trước chỉ là $K = Z - 1$, vì đã loại trừ một đường đi qua 1

Thay (5.49) vào (5.48), được

$$G(1+1, 1+1[1]) = \frac{1}{\eta - \varepsilon_{l+1} - KV^2G(1+2, 1+2[1+1])} . \quad (5.50)$$

Hoàn toàn tương tự, ta có thể viết:

$$G(1+2. 1+2[1+1]) = \frac{1}{\eta - \varepsilon_{l+2} - KV^2G(1+3. 1+3[1+2])} . \quad (5.51)$$

Vì hai nút $(1+1)$ và$(1+3)$ có cùng một năng lượng nút, $\varepsilon_{1+1} = \varepsilon_{1+3}$, nên điều kiện tuần hoàn của mạng cho

$$G(1+3, 1+3[1+2]) = G(1+1, 1+1[1]) .$$

Và, tương-tự:

$$G(1+2, 1+2[1+1]) = G(1, 1[1-1]) .$$

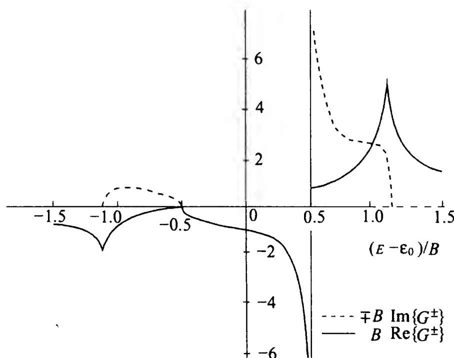
Sử dụng hai đẳng thức này, ta dễ dàng viết lại (5.50) và (5.51) thành hệ hai phương trình hai ẩn mà các lời giải là:

$$G(1+1, 1+1[1]) = \frac{(\eta-\varepsilon_1)(\eta-\varepsilon_2)}{2K(\eta-\varepsilon_l)V^2} \pm \frac{\{(\eta-\varepsilon_1)(\eta-\varepsilon_2)[(\eta-\varepsilon_1)(\eta-\varepsilon_2)-4KV^2]\}^{1/2}}{2K(\eta-\varepsilon_l)V^2} , \quad (5.52)$$

$$G(1, 1[1+1]) = \frac{(\eta-\varepsilon_1)(\eta-\varepsilon_2)}{2K(\eta-\varepsilon_{l+1})V^2} \pm \frac{\{(\eta-\varepsilon_1)(\eta-\varepsilon_2)[(\eta-\varepsilon_1)(\eta-\varepsilon_2)-4KV^2]\}^{1/2}}{2K(\eta-\varepsilon_{\ell+1})V^2} . \quad (5.53)$$

Thay (5.52) và (5.53) trở-lại (5.47) và (5.46), ta nhận được

$$G(1, 1; \eta) = \begin{cases} G(1;\eta) & = 2K(\eta-\varepsilon_2)/D \quad ; \varepsilon_l = \varepsilon_1 \\ G(2;\eta) & = 2K(\eta-\varepsilon_1)/D \quad ; \varepsilon_l = \varepsilon_2 , \end{cases} \quad (5.54)$$



Hình 5.6: Re $\{G^{\pm}(l;\, l)\}$ và $\mp$Im $\{G^{\pm}(l;\, l)\}$ biểu diễn theo E cho mạng Bethe với $Z = 4$: $\varepsilon_{l+2n} = \varepsilon_1$; $\varepsilon_{l+2n+1} = \varepsilon_2$ (n là số nguyên); $\varepsilon_1 \geq \varepsilon_2$, $\varepsilon_0 = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2$, $B = 2\sqrt{KV}$. Minh họa cho trường hợp $\varepsilon_1 - \varepsilon_2 = B$.

trong đó

$$D = K(\eta - \varepsilon_1)(\eta - \varepsilon_2) - (K+1)\Big\{(\eta - \varepsilon_1)(\eta - \varepsilon_2) \pm \left[(\eta - \varepsilon_1)(\eta - \varepsilon_2)\left[(\eta - \varepsilon_1)(\eta - \varepsilon_2) - 4KV^2\right]\right]^{1/2}\Big\}\;. \quad (5.55)$$

Dấu của số hạng $[\ldots]^{1/2}$ được lấy sao cho phần ảo của nó có cùng dấu với Im $\{(\eta - \varepsilon_1)(\eta - \varepsilon_2)\}$.

Từ (5.54) và (5.55) ta nhận thấy phổ liên tục của hệ gồm hai vùng con: vùng dưới chạy từ $(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2 - \left[(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2/4 + 4KV^2\right]^{1/2}$ đến ε_2, vùng trên chạy từ ε_1 đến $(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2 + \left[(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2/4 + 4KV^2\right]^{1/2}$. Còn, mật độ trạng thái ρ_j tại các nút với năng lượng ε_j ($j = 1, 2$) là:

$$\rho_j(E) = -\frac{1}{\pi}\,\text{Im}\left\{G^{+}(j\,;\,E)\right\}\,;\; j = 1,\,2$$

Trên hình 5.6 trình bày minh họa của các hàm Re $\{G^{\pm}(1;1)\}$ và Im $\{G^{\pm}(1;1)\}$ tính cho mạng Bethe với $Z = 4$ $(K = 3)$ và $\varepsilon_1 - \varepsilon_2 = B$ (Economou 1983). Rõ-ràng là ở ngưỡng trên và ngưỡng dưới của vùng hàm Green có dáng điệu giải tích điển hình của các hệ 3 chiều. Tuy nhiên, ở một ngưỡng bên trong $((E - \varepsilon_0)/B = 0.5)$ ta thấy có phân kỳ dạng căn bậc hai của năng lượng.

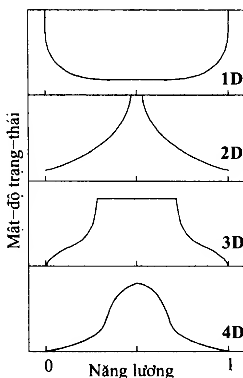
Thảo luận bổ sung và bài tập

B5.1 Về bản chất, lý thuyết liên kết mạnh (tight binding) là lý thuyết một hạt trường trung bình. Lý thuyết này đã được sử dụng rộng rãi kể từ khi Slater và Koster thành công trong việc dùng nó để tính cấu trúc vùng của các tinh thể đơn giản (Slater and Koster 1954). Nhưng, sau đó, trong thời gian dài, do sự xuất hiện của lý thuyết hàm mật độ (density functional theory) và sự tiến bộ về khả năng của máy tính, lý thuyết liên kết mạnh (LKM) đã bị thay thế bằng phương pháp tính dựa trên các nguyên lý ban đầu (first principles hay ab initio method). Chỉ gần đây, do phải làm việc với các kích thước lớn, người ta mới quay lại với LKM với sự kết hợp với "ab initio". Sự kết hợp như vậy làm tăng mức độ chính xác định lượng của tính toán.

Dạng quen thuộc của Hamiltonian LKM gồm các số hạng nút (on site) và các số hạng nhảy (hopping):

$$\mathcal{H} = \sum_{i\alpha} \varepsilon_{i\alpha} C_{i\alpha}^{+} C_{i\alpha} + \sum_{i,\alpha\beta} t_{i\alpha,j\beta} C_{i\alpha}^{+} C_{j\beta} \ ,$$

trong đó các chỉ số i, j mô tả các nguyên tử nút mạng; α, β ký hiệu các quỹ đạo ở các nguyên tử này; yếu tố chéo $\varepsilon_{i\alpha}$ là năng lượng nút (on site energy); còn yếu tố không chéo $t_{i\alpha,j\beta}$ thường giảm nhanh theo khoảng cách giữa các nút i và j. Trong tính toán LKM hiện đại, các tham số $\varepsilon_{i\alpha}$ và $t_{i\alpha,j\beta}$ thường được xác định bằng cách khớp các trị riêng LKM với các trị riêng "ab initio" (Xu et al. 1992; Meht and Papaconstantopoulos 1996). Phương pháp LKM đóng vai trò rất quan trọng trong nghiên cứu cấu trúc vùng của vật liệu.



Hình 5.7: Minh họa cho bài tập B5.3

B5.2 Từ các kết quả trong tiết 5.3.2 hãy rút ra hàm Green cho mạng Bethe tuần hoàn đơn giản, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_0$. Biện luận kết quả nhận được.
Trả lời:

$$G(l, l; \eta) = \frac{2K}{(K-1)(\eta - \varepsilon_0) + (K+1)\sqrt{(\eta - \varepsilon_0)^2 - 4KV^2}}.$$

B5.3 Trên hình 5.7 là dáng điệu điển hình của vùng năng lượng electron liên kết mạnh trong các hệ $d = 1, 2, 3$ và 4 chiều. Độ rộng vùng được chuẩn hóa bằng 1. Hãy cho biết dáng điệu mật độ trạng thái trong trường hợp $d \to \infty$?

Trả lời: xem W. Metzner and D.Vollhardt 1989, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324

Chương 6

Tán xạ một tâm tạp

Nội dung của chương này là áp dụng phương pháp nhiễu loạn không phụ thuộc thời gian, đã trình bày ở chương 4, vào bài toán tán xạ của electron lên một tâm tạp riêng lẻ trong khuôn khổ hình thức luận liên kết mạnh.

6.1 Hình thức luận chung

Xét mô hình liên kết mạnh, trong đó tính tuần hoàn lý tưởng được thỏa mãn ở khắp nơi, trừ tại một nút (nút l). Ở nút này yếu tố ma trận chéo là $\varepsilon_l = \varepsilon_0 + \varepsilon$, trong khi ở tất cả các nút khác chúng đều là ε_0 (chẳng hạn, nguyên tử ở tất cả các nút mạng đều giống nhau với cùng mức năng lượng ε_0, riêng ở nút l nguyên tử mạng chủ bị thay thế bằng một nguyên tử lạ - tâm tạp - với mức năng lượng $\varepsilon_l = \varepsilon_0 + \varepsilon$). Hamiltonian liên kết mạnh của mô hình này có thể viết dưới dạng:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 , \tag{6.1}$$

trong đó phần không nhiễu loạn $\mathcal{H}_0$ chính là Hamiltonian tuần hoàn lý tưởng (5.4),

$$\mathcal{H}_0 = \sum_m |\,\mathrm{m}\rangle\, \varepsilon_0 \,\langle \mathrm{m}| + V \sum_{(n\,m)} |\,\mathrm{n}\rangle \,\langle \mathrm{m}| \ , \tag{6.2}$$

còn phần nhiễu loạn $\mathcal{H}_1$ liên quan chỉ với "tâm tạp" ở nút l

$$\mathcal{H}_1 = |\,\mathrm{l}\rangle\, \varepsilon \,\langle \mathrm{l}| \ . \tag{6.3}$$

Theo (4.3), hàm Green của Hamiltonian toàn phần $\mathcal{H}$ có thể biểu diễn dưới dạng

$$G = G_0 + G_0\mathcal{H}_1 G_0 + G_0\mathcal{H}_1 G_0 \mathcal{H}_1 G_0 + \dots , \tag{6.4}$$

với G_0 là hàm Green của Hamiltonian không nhiễu loạn (6.2). Hàm này đã được nghiên cứu chi tiết và tính cụ thể cho một số mạng trong chương 5.

Trong tiết 4.1 cũng đã chỉ ra rằng, đồng thời với G ta có thể tính T-matrận (4.11):

$$\begin{aligned} T &= \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_1 G_0 \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_1 G_0 \mathcal{H}_1 G_0 \mathcal{H}_1 + \ldots \\ &= |1\rangle\, \varepsilon \,\langle 1| + |1\rangle\, \varepsilon \,\langle 1|\; G_0 \;|1\rangle\, \varepsilon\, \langle 1| + \ldots \\ &= |1\rangle\, \varepsilon \{1 + \varepsilon\, G_0\,(1,\, 1) + [\varepsilon G_0\,(1,\, 1)]^2 + \ldots\}\,\langle 1| \\ &= |1\rangle\, \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon\, G_0\,(1,\, 1;\, \eta)}\,\langle 1|\,, \end{aligned} \tag{6.5}$$

ở-đây $G_0\,(1,\, 1;\, \eta) \equiv \langle 1|\; G_0\,(\eta)\,|1\rangle$.
Biểu thức (6.5) xác định T-matrận của hệ liên kết mạnh khi có nhiễu loạn do chỉ một tâm tạp tại nút 1 với yếu tố ma trận ε.

Thay T nhận được ở trên vào hệ thức (4.14),

$$G = G_0 + G_0 T G_0\,,$$

ta được hàm Green G xác định qua G_0 và nhiễu loạn ε:

$$G = G_0 + G_0\,|1\rangle\, \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon\, G_0\,(1,\, 1;\, \eta)}\,\langle 1|\, G_0\,. \tag{6.6}$$

Tính chất giải tích của T-matrận (6.5) và hàm Green (6.6) là tương tự nhau. Phân tích các tính chất này ta có thể biết hàm riêng và trị riêng của $\mathcal{H}$.

6.1.1 Trạng thái liên kết

Từ (6.6) (hay (6.5)) ta thấy hàm G (hay T) có cực điểm tại $\eta = E_p$, xác định bằng điều kiện $1 - \varepsilon\, G_0\,(1,\, 1;\, E_p) = 0$, hay

$$G_0\,(1,\, 1;\, E_p) = 1/\varepsilon\,. \tag{6.7}$$

Tất nhiên là cực E_p không thể nằm trong vùng phổ liên tục của $\mathcal{H}_0$ vì ở đó phần ảo của $G_0\,(1,\, 1;\, E)$ (tức là mật độ trạng thái) luôn khác không và do đó không thể có hệ thức (6.7). Hệ thức này cho phép xác định vị trí các mức liên kết, sinh ra do có nhiễu loạn ε.

Đồng thời, từ (6.6) ta có thặng dư của hàm Green G tại cực điểm E_p là:

$$\mathrm{Res}\{G(\mathbf{n}, \mathbf{m}; E_p)\} = -\frac{G_0(\mathbf{n}, \mathbf{l}; E_p)\, G_0(\mathbf{l}, \mathbf{m}; E_p)}{G_0'(\mathbf{l}, \mathbf{l}; E_p)}, \qquad (6.8)$$

trong đó G_0' là đạo hàm của G_0 theo E.

Độ suy biến f_p của mức liên kết E_p được tính bằng (2.98):

$$\begin{aligned} f_p &= \mathrm{Tr}\{\mathrm{Res}\{G(E_p)\}\} \\ &= \sum_n \mathrm{Res}\{G(\mathbf{n}, \mathbf{n}; E_p)\} \\ &= -\frac{1}{G_0'(\mathbf{l}, \mathbf{l}; E_p)} \sum_n G_0(\mathbf{n}, \mathbf{l}; E_p)\, G_0(\mathbf{l}, \mathbf{n}; E_p) \\ &= -\frac{\langle \mathbf{l}|\, (E_p - \mathcal{H}_0)^{-2}\, |\mathbf{l}\rangle}{G_0'(\mathbf{l}, \mathbf{l}; E_p)} = 1. \end{aligned}$$

Dấu bằng cuối cùng trong biến đổi trên là do

$$\begin{aligned} dG_0/dE &= d\left[\langle \mathbf{l}|\, (E - \mathcal{H}_0)^{-1}\, |\mathbf{l}\rangle\right]/dE \\ &= -\langle \mathbf{l}|\, (E - \mathcal{H}_0)^{-2}\, |\mathbf{l}\rangle. \end{aligned} \qquad (6.9)$$

Vì độ suy biến $f_p = 1$, theo (2.90), hàm riêng $|\, b)$, tương ứng năng lượng E_p, thỏa mãn hệ thức

$$\langle \mathbf{n}|\, b)\, (b|\, \mathbf{m}\rangle = \mathrm{Res}\, G(\mathbf{n}, \mathbf{m}; E_p).$$

Thay vế phải của đẳng thức trên bằng (6.8), ta có

$$|\, b) = \frac{G_0(E_p)}{\sqrt{-G_0'(\mathbf{l}, \mathbf{l}; E_p)}}. \qquad (6.10)$$

Hoặc, nếu biểu diễn $|\, b)$ dưới dạng

$$|\, b) = \sum_n b_n\, |\mathbf{n}\rangle,$$

thì

$$b_n = \frac{G_0(\mathbf{n}, \mathbf{l}; E_p)}{\sqrt{-G_0'(\mathbf{l}, \mathbf{l}; E_p)}}. \qquad (6.11)$$

Để đoán nhận dáng điệu của trạng thái liên kết (6.10) ta lưu ý là, với E không thuộc phổ liên tục thì, một là, theo (6.9), đại lượng $G_0'(1, 1; E)$ luôn âm, và hai là, $G_0(n, l; E)$ giảm nhanh theo khoảng cách $R_{nl} \equiv |n - l|$:

$$G_0(n, l; E) \xrightarrow[R_{nl} \to \infty]{} \text{const.} \exp\left[-\alpha(E) R_{nl}\right], \tag{6.12}$$

với $\alpha(E) > 0$ (xem, chẳng hạn (5.21)). Điều này nghĩa là hàm riêng (6.10), tương ứng với trị riêng gián đoạn E_p, có dáng điệu định xứ ở lân cận tâm tạp tại l, giảm nhanh khi đi ra xa tâm này theo quy luật hàm e-mũ (6.12). Ở đây, đại lượng $[\alpha(E)]^{-1}$ là số đo mức độ lan truyền tuyến tính của $|b\rangle$. Trên hình 6.1a ta mô tả định tính dáng điệu của biên độ xác suất $|\langle n|\psi(E_p)\rangle|^2$ như hàm của khoảng cách R_{nl}. Đại lượng α^{-1} đặc trưng cho "kích thước" của trạng thái. Ví dụ, trong mạng một chiều với hàm Green (5.21) thì

$$\alpha(E) = -\ln\left\{\left|\frac{E - \varepsilon_0}{B}\right| - \sqrt{(E - \varepsilon_0)^2/B^2 - 1}\right\}/a,$$

với $(E - \varepsilon_0) > B$ và a là hằng số mạng.

6.1.2 Vùng phổ liên tục

Ta xem xét ảnh hưởng của nhiễu loạn lên phổ liên tục của hệ, mà đặc trưng cơ bản của nó là mật độ trạng thái.

Theo (2.93), với G (6.6) thì mật độ trạng thái tại nút n là:

$$\begin{aligned}\rho(n; E) &= -\frac{1}{\pi}\operatorname{Im}\left\{G^+(n, n; E)\right\} \\ &= \rho_0(n; E) - \frac{1}{\pi}\operatorname{Im}\left\{\frac{\varepsilon\langle n|G_0^+(E)|l\rangle\langle l|G_0^+(E)|n\rangle}{1 - \varepsilon G_0^+(l, l; E)}\right\},\end{aligned} \tag{6.13}$$

trong đó $\rho_0(n; E)$ là mật độ trạng thái của hệ không nhiễu loạn $\mathcal{H}_0$. Sự có mặt của nhiễu loạn (tâm tạp) tại nút l dẫn đến số hạng thứ hai trong biểu thức $\rho(n; E)$ ở trên.

Trong trường hợp riêng, ngay tại nút 1 ta có

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{1};\,E) &= \rho_0(\mathbf{1};\,E) - \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\left\{\frac{\varepsilon\,\langle\mathbf{1}|\,G_0^+(E)\,|\,\mathbf{1}\rangle\,\langle\mathbf{1}|\,G_0^+(E)\,|\,\mathbf{1}\rangle}{1-\varepsilon\,G_0^+(\mathbf{1},\mathbf{1};\,E)}\right\} \\ &= \frac{\rho_0(\mathbf{1};\,E)}{|1-\varepsilon\,G_0(\mathbf{1},\mathbf{1};\,E)\,|^2}\,. \end{aligned} \tag{6.14}$$

Việc chuyển từ dòng đầu đến dòng thứ hai trong (6.14) được thực hiện bằng phép lấy phần ảo thông thường với chú ý đến các hệ thức (2.11) và (2.13).

Với dáng điệu tiệm cận $G_0(E) \to 1/E$, và do đó $G(E) \to 1/E$ khi $E \to \infty$, sử dụng định lý tích phân Cauchy, có thể thấy là, mật độ trạng thái (6.13) thỏa mãn điều kiện $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(\mathbf{n};\,E)\,dE = 1$.

Bức tranh vật lý nhận được từ kết quả (6.13) là như sau: mặc dù vùng phổ liên tục của $\mathcal{H}$ và $\mathcal{H}_0$ là trùng nhau, nhưng mật độ trạng thái tương ứng $\rho(E)$ và $\rho_0(E)$ là không như nhau. Với hệ có nhiễu loạn, ngoài vùng phổ liên tục còn có trạng thái liên kết ở E_p, mà tại đó, sử dụng (2.16) ta có

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{n};\,E) &= -\frac{1}{\pi}(-\pi)\sum_{n}\delta(E-E_p)\,\langle\mathbf{n}|b\rangle\,\langle b|\mathbf{n}\rangle \\ &= |b_n|^2\delta(E-E_p)\,,\quad E\approx E_p\,. \end{aligned} \tag{6.15}$$

Thành thử, thay vì $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(\mathbf{n};\,E)\,dE = 1$, trong trường hợp này ta có

$$\int_{E_D}^{E_U} \rho(\mathbf{n};\,E)\,dE + \sum_{p} |b_n|^2 = 1. \tag{6.16}$$

Ở đây, số hạng đầu ứng với vùng phổ liên tục chạy từ ngưỡng dưới E_D đến ngưỡng trên E_U, số hạng thứ hai lấy tổng theo tất cả các trạng thái liên kết E_p. Nếu tất cả các hàm riêng của trạng thái liên kết đều được chuẩn hóa, thì bằng cách lấy tổng (6.16) theo tất cả các nút trong mạng, ta được:

$$\int_{E_D}^{E_U} \mathcal{N}(E)\,dE + P = N\,, \tag{6.17}$$

trong đó $\mathcal{N}(E)$ là mật độ trạng thái trên tất cả các nút, P là số trạng thái liên kết và N là tổng số nút của mạng. Hệ thức (6.17) cho thấy rằng, cùng

với sự xuất hiện các trạng thái liên kết, mật độ trạng thái trong vùng phổ liên tục giảm đi (so với $\rho_0(E)$). Phần giảm đi này được "chuyển" sang cho các mức gián đoạn và trọng khối "tiếp nhận" của mỗi mức được đo bằng đại lượng phủ $|b_n|^2$ của mức này tại nút n.

Ta chuyển sang xem xét các trạng thái riêng trong vùng phổ liên tục. Đó là các trạng thái tán xạ dạng (4.23):

$$|\psi_E) = |\mathbf{k}) + G_0^+(E)\, T^+(E)\, |\mathbf{k}) . \qquad (6.18)$$

Ở đây, $|\mathbf{k})$ là hàm riêng (dạng (5.9)) của Hamiltonian liên kết mạnh tuần hoàn $\mathcal{H}_0$ (ta dùng ký hiệu $|\mathbf{k})$ thay cho $|\mathbf{k}\rangle$ để phân biệt với $|\mathbf{n}\rangle$, trong đó n là chỉ số nút), còn dấu $(+)$ ở $G_0^+\, T^+$ ngụ ý chỉ chọn lời giải đi ra từ tâm tán xạ.

Đặt T^+ (6.5) vào (6.18), được

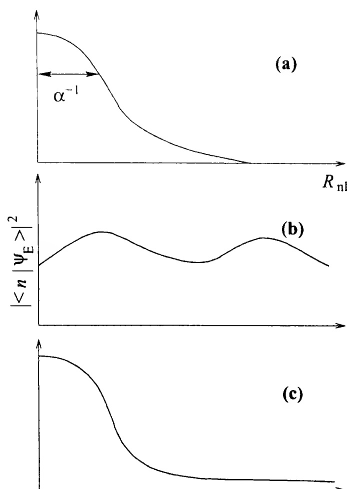
$$\langle \mathbf{n}|\psi_E) = \langle \mathbf{n}|\, \mathbf{k}) + \frac{\langle \mathbf{n}|\, G_0^+(E)\,|\mathbf{l}\rangle\, \varepsilon\, \langle \mathbf{l}|\, \mathbf{k})}{1 - \varepsilon\, G_0^+(\mathbf{l}, \mathbf{l};\, E)} . \qquad (6.19)$$

Hàm riêng (6.19) có dạng tổng của hàm sóng không nhiễu loạn $\langle \mathbf{n}|\, \mathbf{k})$ và phần bổ chính do nhiễu loạn có mặt tại nút l. Như vậy, bên trong vùng phổ liên tục hàm riêng là một hàm lan truyền bị biến điệu do nhiễu loạn. Một cách định tính, hàm này được mô tả bằng sơ đồ trên hình 6.1b. Tại chính nút l hàm (6.19) có dạng

$$\langle \mathbf{l}|\psi_E) = \frac{\langle \mathbf{l}|\, \mathbf{k})}{1 - \varepsilon\, G_0^+(\mathbf{l}, \mathbf{l};\, E)} . \qquad (6.20)$$

Trong liên quan với các trạng thái vùng, ở tiết 4.2 ta đã chỉ ra rằng, tiết diện tán xạ vi phân $|f|^2$ để một sóng tới $|\,\mathbf{k}_I)$ tán xạ đến trạng thái cuối $|\,\mathbf{k}_f)$ là tỷ lệ với $|\,(\,\mathbf{k}_f|\, T^+(E)\,|\,\mathbf{k}_I)\,|^2$ (xem (4.31), (4.32)). Với $|\,\mathbf{k}_I)$ và $|\,\mathbf{k}_f)$ là các trạng thái không nhiễu loạn, sử dụng T^+ (6.5) ta dễ dàng nhận được:

$$|f|^2 = \frac{\varepsilon^2}{|1 - \varepsilon\, G_0^+(\mathbf{l}, \mathbf{l};\, E)\,|^2} . \qquad (6.21)$$



Hình 6.1: Minh họa định tính phụ thuộc của $|\langle n|\psi_E\rangle|^2$ vào khoảng cách R_{nl}: (a) Trạng thái liên kết; (b) Trạng thái vùng; (c) Trạng thái cộng hưởng.

6.1.3 Trạng thái cộng hưởng

Như trên đã nói, hàm $G_0^{\pm}(1, 1; E)$ có phần ảo khác không ở các năng lượng thuộc vùng liên tục, và do đó bên trong vùng này đại lượng $(1 - \varepsilon G_0^{\pm}(1, 1; E))$ không thể bằng không. Tuy nhiên, ở những điều kiện nhất định, đại lượng $|1 - \varepsilon G_0^{+}(1, 1; E)|^2$ có thể là rất nhỏ ở năng lượng $E = E_r$ nào đó. Nếu vậy, tại các năng lượng E_r này đại lượng $|\langle 1|\psi_E\rangle|^2$ (6.20) trở nên rất lớn. Trong khi đó, với $n \neq l$, đại lượng $\langle n|G_0^{+}(E)|1\rangle$ ở số hạng thứ hai của (6.19) lại giảm nhanh tới 0, khi khoảng cách $R_{nl} \to \infty$. Thành thử, trong giới hạn này, đại lượng $|\langle 1|\psi_E\rangle|^2$ của (6.19) dần về $|\langle n|\mathbf{k}\rangle|^2$ của trạng thái không nhiễu loạn. Ta có bức tranh vật lý như sau. Tại năng lượng E_r nào đó, biên độ $|\langle n|\psi_E\rangle|$ có giá trị lớn ở lân cận nút 1, giảm theo khoảng

cách $|\mathbf{n} - \mathbf{l}|$, rồi dần tới giới hạn là biên độ $|\langle \mathbf{n}|\, \mathbf{k}\rangle|$ của sóng không nhiễu loạn. Các trạng thái riêng $\langle \mathbf{n}|\, \psi_E\rangle$ có tính chất như vậy được gọi là trạng thái cộng hưởng (resonant eigenstates). Biên độ của các trạng thái này được mô tả định tính trên hình 6.1c. Các trạng thái cộng hưởng vừa có dáng dấp trạng thái liên kết vì xác suất tìm hạt ở lân cận nút l là rất lớn hơn so với ở các nút khác, chúng lại vừa là trạng thái lan truyền giống như các trạng thái liên tục khác.

Bởi vì tại năng lượng cộng hưởng, các mẫu số ở (6.14) cũng như (6.21) đều rất nhỏ, nên cả mật độ trạng thái cũng như tiết diện tán xạ đều có cực đại nhọn. Tất nhiên, cực đại ở $\rho\,(1;\, E)$ (6.14) còn phụ thuộc vào dáng điệu phụ thuộc năng lượng của $\rho_0\,(1,\, E)$ ở lân cận $E = E_r$.

Một cách gần đúng, năng lượng cộng hưởng E_r có thể xác định bằng cách như sau. Ta viết các mẫu số của (6.14) và (6.21) dưới dạng

$$|1 - \varepsilon\, G_0^+\,(l,\, l;\, E)\,|^2 = \left(1 - \varepsilon\, \mathrm{Re}\{G_0^+\}\right)^2 + \varepsilon^2 \left(\mathrm{Im}\{G_0^+\}\right)^2 .$$

Nếu $\mathrm{Im}\{G_0^+\}$, tức $\rho_0\,(E)$, thay đổi chậm theo E ở lân cận E_r, thì năng lượng cộng hưởng E_r có thể xác định gần đúng như lời giải của phương trình

$$(1 - \varepsilon\, \mathrm{Re}\{G_0\,(1,\, 1;\, E)\})^2 = 0. \tag{6.22}$$

Tất nhiên, để cộng hưởng là nhọn thì đại lượng $\varepsilon^2 \left(\mathrm{Im}\{G_0^+\}\right)^2$ cũng phải nhỏ (so với 1).

Nếu không chỉ $\mathrm{Im}\{G_0\}$ mà cả $\mathrm{Re}\{G_0\,(1,\, 1;\, E)\}$ cũng phụ thuộc yếu vào E trong lân cận E_r, thì một cách gần đúng, có thể viết:

$$|1 - \varepsilon\, G_0\,(1,\, 1;\, E)|^2 \approx A^{-2}\{(E - E_r)^2 + J^2\}, \quad E \approx E_r\,, \tag{6.23}$$

trong đó

$$\begin{aligned} J &= |\mathrm{Im}\{G_0\,(1,\, 1;\, E_r)\}|/|\mathrm{Re}\{G_0'\,(1,\, 1;\, E_r)\}|\,, \\ A^{-1} &= |\varepsilon\, \mathrm{Re}\{G_0'\,(1,\, 1;\, E_r)\}|\,. \end{aligned}$$

Thay biểu thức gần đúng (6.23) vào (6.13), (6.20) và (6.21), ta có

$$\rho(1; E) = \frac{A^2 \rho_0(1; E)}{(E - E_r)^2 + J^2} = \frac{A^2 \rho_0(1, E)}{|E - \eta_r|^2}. \quad (6.24)$$

$$|\langle 1 | \psi_E \rangle|^2 = \frac{1}{N} \frac{A^2}{(E - E_r)^2 + J^2} = \frac{(A^2/N)}{|E - \eta_r|^2}. \quad (6.25)$$

$$|f|^2 = \frac{A^2 \varepsilon^2}{(E - E_r)^2 + J^2} = \frac{A^2 \varepsilon^2}{|E - \eta_r|^2}, \quad (6.26)$$

trong đó $\eta_r = E_r - iJ$.

Như vậy, trong khuôn khổ gần đúng (6.23) các trạng thái cộng hưởng xuất hiện như các cực trong nửa mặt phẳng dưới (hoặc trên) của thác triển giải tích hàm $G^+(1, 1; E)$ (hoặc $G^-(1, 1; E)$) ngang qua cắt nhánh. Mệnh đề ngược lại cũng đúng: nếu thác triển giải tích của hàm $G^\pm$ qua cắt nhánh có cực gần trục thực ($J/B \ll 1$, trong đó B là nửa độ rộng vùng), thì các cực đó xác định năng lượng cộng hưởng. Các biểu thức dạng đơn giản (6.24) (6.26) là hệ quả của gần đúng (6.23), và tất nhiên nếu thác triển giải tích của $G^\pm$ phức tạp hơn, thì các biểu thức tương ứng của ρ, $|\langle 1 | \psi_E \rangle|^2$ và $|f|^2$ sẽ không còn đơn giản như (6.24)- (6.26) nữa.

Ta kết thúc tiết này bằng một bài toán minh hoạ đơn giản. Xét một hạt có trạng thái chuyển động mô tả bởi Hamiltonian $\mathcal{H}$. Giả sử tại thời điểm ban đầu, $t = 0$, hạt ở nút 1, nghĩa là, ở thời điểm này biên độ trạng thái của hạt tại nút n bất kỳ là $C_n(t = 0) = \delta_{nl}$. Sử dụng hệ thức tiến hóa (2.51) và các hệ thức (2.45), (2.43), ta có ngay biên độ xác suất tìm hạt cũng tại chính nút 1, nhưng ở thời điểm $t > 0$ bất kỳ là:

$$C_l(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-iEt/\hbar)\, G^+(1, 1; E)\, dE. \quad (6.27)$$

Tham gia đóng góp vào (6.27) có thể có ba loại trạng thái.

Phần đóng góp từ các trạng thái liên kết (ứng với cực của hàm $G^+(1, 1; E)$) là:

$$\begin{aligned} C_{lb}(t) &= \frac{i}{2\pi} \left[-2\pi i \operatorname{Res}\{G^+(1, 1; E_p)\}\, e^{-iE_pt/\hbar}\right] \\ &= |b_l|^2 \exp(-iE_pt/\hbar). \end{aligned} \quad (6.28)$$

Kết quả này nhận được bằng cách tích phân trực tiếp (6.27) rồi để ý đến hệ thức sát trên (6.10). Biểu thức (6.28) ngụ ý rằng, do sự có mặt của trạng thái liên kết $|b\rangle$ nên hạt không khuyếch tán đi xa, ngay cả khi $t \rightarrow \infty$ thì xác suất tìm hạt ở chính điểm xuất phát l vẫn là hữu hạn, $\propto |b_l|^4$.

Phần đóng góp từ các trạng thái vùng liên tục (hình 6.1b) là:

$$C_{lz}(t) \propto \exp\left(-|a|\, Bt/\hbar\right); \quad t \gg \hbar/B, \qquad (6.29)$$

trong đó a là hằng số bậc đơn vị. Đóng góp (6.29) giảm nhanh theo thời gian (với thời gian "sống" đặc trưng là $\approx \hbar/B\,|a|$). Như vậy, khi $t \rightarrow \infty$, các trạng thái liên tục hầu như không đóng góp vào xác suất tìm hạt ở nút l: chúng trợ giúp cho hạt khuyếch tán đi ra xa l.

Cuối cùng, phần đóng góp vào $C_l(t)$ (6.27) từ các trạng thái cộng hưởng, trong khuôn khổ gần đúng (6.23) - (6.26), là:

$$C_{lr}(t) \propto e^{-Jt/\hbar} . e^{-iE_r t/\hbar}. \qquad (6.30)$$

Với $t \ll \hbar/J$, đóng góp (6.30) có dạng tương tự như (6.28) của các trạng thái liên kết (tất nhiên là $J \ll B$, tức là $\hbar/J \gg \hbar/B$). Còn với $t \gg \hbar/J$, thì (6.30) lại có dạng gần với (6.29) của các trạng thái vùng, góp phần trợ giúp cho hạt khuyếch tán ra xa l.

Tóm lại, với mô hình khảo sát trong tiết này, có thể tồn tại ba loại trạng thái riêng: (i) các trạng thái liên kết với mức năng lượng gián đoạn; (ii) các trạng thái vùng liên tục với hàm sóng tán xạ; và (iii) các trạng thái cộng hưởng, có thể xuất hiện trong miền phổ liên tục. Đó là các trạng thái lan truyền có biên độ cao hơn đáng kể ở lân cận tâm tạp. Năng lượng riêng tương ứng với các trạng thái này (năng lượng cộng hưởng) được xác định như là năng lượng, mà tại đó mật độ trạng thái cũng như tiết diện tán xạ có cực đại nhọn. Cực đại này có nguồn gốc từ cực đơn trong thác triển giải tích hàm $G^{\pm}(1, 1; E)$ qua cắt nhánh: phần thực của cực cho năng lượng cộng hưởng, còn nghịch đảo của phần ảo cho thời gian sống, liên quan với sự khuyếch tán của hạt đi xa khỏi vị trí ban đầu.

6.2 Lời giải cho một số mạng đơn giản

Trong tiết này, hình thức luận chung trình bày ở tiết trên sẽ được minh họa bằng giải cụ thể bài toán cho ba loại mạng đơn giản, nhưng quan trọng.

6.2.1 Hệ ba chiều: mạng lập phương đơn giản

Trở lại giản đồ hàm Green của bài toán liên kết mạnh trong mạng lập phương đơn giản trên hình 5.3. Dáng điệu điển hình của mật độ trạng thái ở gần các ngưỡng vùng là:

$$\rho_0\,(1\,;\,E) \propto \begin{cases} \sqrt{E - E_D} & \text{, gần ngưỡng dưới } E_D\,. \\ \sqrt{E_U - E} & \text{, gần ngưỡng trên } E_U\,. \end{cases} \tag{6.31}$$

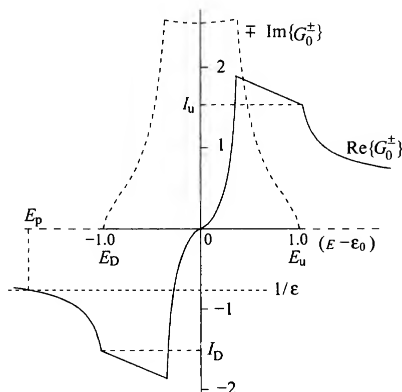
Đồng thời, các đại lượng $I_D = \mathrm{Re}\{G_0\,(1,1;\,E_D)\}$ và $I_U = \mathrm{Re}\{G_0\,(1,1;\,E_U)\}$ đều là hữu hạn. Mặt khác, vì ở ngoài vùng $dG_0/dE < 0$ (6.9) và $G_0 \to 0$ khi $|E| \to \infty$, nên ta có

$$\left.\begin{array}{lll} 0 < G_0\,(1,\,1;\,E) < I_u & \text{, với } E > E_U\,. \\ I_D < G_0\,(1,\,1;\,E) < 0 & \text{, với } E < E_D\,. \end{array}\right\} \tag{6.32}$$

Thành ra, khi giải phương trình (6.7) để tìm năng lượng liên kết, ta có hai trường hợp tương ứng với ngưỡng trên $(E_U,\,I_U)$ và ngưỡng dưới $(E_D,\,I_D)$. Vì bức tranh cấu trúc vùng (hình 6.2) là đối xứng với hai ngưỡng, nên ta chỉ cần xét chi tiết một trường hợp, chẳng hạn xét ngưỡng dưới. Tùy theo giá trị của nhiễu loạn $\varepsilon < 0$ ta có hai khả năng:
Một là, $1/\varepsilon > I_D$. Trong trường hợp này, như minh họa trên hình 6.2, đường $1/\varepsilon$ luôn cắt $G_0\,(1,\,1;\,E)$ và chỉ cắt tại một điểm. Điểm đó chính là lời giải của (6.7) và cho năng lượng trạng thái liên kết E_p, $E_p < E_D$.
Hai là, $1/\varepsilon < I_D < 0$. Trong trường hợp này, ở bên ngoài vùng, đường $1/\varepsilon$ nằm thấp hơn và không bao giờ cắt $G_0\,(1,\,1;\,E)$. Phương trình (6.7) không có lời giải. Hệ không có trạng thái liên kết.

Ý nghĩa vật lý của kết quả trên là: một nhiễu loạn hút ($\varepsilon < 0$) chỉ có thể tạo ra trạng thái liên kết với $E_p < E_D$ nếu cường độ $|\varepsilon|$ của nó vượt quá giá trị $1/|I_D|$, $|\varepsilon| > 1/|I_D|$ hay $\varepsilon < I_D^{-1}$ (nhớ rằng, ε, $I_D < 0$). Nói cách khác,

trong hệ ba chiều, các nhiễu loạn cường độ nhỏ (hố thế nông) có thể không tạo ra được trạng thái liên kết.

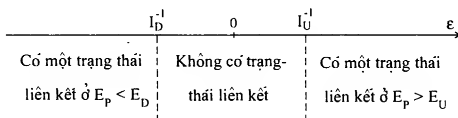


Hình 6.2: Minh họa cho lời giải của phương trình (6.7) trong mạng lập phương đơn giản khi $\varepsilon < I_D^{-1} < 0$ $(B = 1)$

Hoàn toàn tương tự cho trường hợp ngưỡng trên với nhiễu loạn đẩy ($\varepsilon > 0$) ta cũng có thể kết luận: để có một (và chỉ một) trạng thái liên kết ở E_p cao hơn ngưỡng E_U, cường độ nhiễu loạn ε phải vượt quá giá trị I_U^{-1}, $\varepsilon > I_U^{-1} > 0$. Trong mô hình liên kết mạnh đang khảo sát, nhiễu loạn đẩy ($\varepsilon > 0$) cũng có thể giam giữ một hạt lượng tử tại một mức liên kết nằm cao hơn trần của vùng không nhiễu loạn. Bức tranh cấu trúc vùng ở đây là hoàn toàn đối xứng với hai ngưỡng. Đây là điểm mới định tính của mô hình liên kết mạnh so với mô hình hạt tự do, ở đó vùng chỉ có một ngưỡng dưới, và do đó không có lý do gì để thảo luận về khả năng giam giữ hạt bằng một nhiễu loạn đẩy.

Bức tranh vùng hai ngưỡng ở đây gợi nhớ về sự khác dấu của khối lượng hiệu dụng ở gần các ngưỡng vùng được giới thiệu vắn tắt trong tiết 1.3. Ở

gần ngưỡng dưới của vùng, khối lượng hiệu dụng của electron được xem là dương, còn ở gần ngưỡng trên (trần) là âm. Thành ra, lực đẩy tác dụng lên hạt ở ngưỡng trên sẽ cho cùng hệ quả như lực hút tác dụng lên hạt ở ngưỡng dưới, cả hai đều có thể dẫn đến sự xuất hiện trạng thái liên kết. Bức tranh chung về khả năng xuất hiện trạng thái liên kết cũng như vị trí của nó trong sự phụ thuộc vào ε cho hệ ba chiều được mô tả bằng sơ đồ



Để thấy rõ hơn sự thay đổi phổ năng lượng khi cường độ nhiễu loạn tăng dần từ 0, ta xét một ví dụ đơn giản, khi hàm Green không nhiễu loạn có thể gần đúng bằng hàm Hubbard (5.35)

$$G_0(1, 1; E) = \frac{2}{E \pm \sqrt{E^2 - B^2}} . \tag{6.33}$$

Ở đây, không mất tính tổng-quát, ta đã xem $\varepsilon_0 = 0$. Khi đó, hai ngưỡng vùng là

$$E_D = -B \text{ và } E_U = +B . \tag{6.34}$$

Và do đó, bằng thay trực tiếp (6.34) vào (6.33), ta có

$$I_D = -2/B = 2/E_D \; ; \; I_U = 2/B = 2/E_U . \tag{6.35}$$

Mức liên kết E_p được xác định bằng phương trình (6.7) với $G_0(1, 1; E)$ (6.33):

$$1/\varepsilon = \frac{2}{E_p + \sqrt{E_p^2 - B^2}} .$$

Từ đây có

$$E_p = \left(B^2 + 4\varepsilon^2\right)/4\varepsilon . \tag{6.36}$$

Rõ ràng là mức liên kết E_p (6.36) chỉ tồn tại (nằm cách tâm vùng một khoảng lớn hơn nửa độ rộng vùng B), nếu $|\varepsilon| > B/2 = I_U^{-1} = |I_D|^{-1}$.

Mật độ trạng thái có nhiễu loạn được xác định bằng (6.14) trong đó mật độ trạng thái không nhiễu loạn, tương ứng với hàm Green (6.33), có dạng (5.36) : $\rho_0\,(1\,;\,E) = (2/\pi B^2)\,\sqrt{B^2 - E^2}$.

Thay biểu thức $\rho_0\,(1\,;\,E)$ này và $G_0\,(1,\,1;\,E)$ (6.33) vào (6.14), sau khi rút gọn, ta được

$$\rho\,(1\,;\,E) = \frac{2}{\pi}\,\frac{\sqrt{B^2 - E^2}}{B^2 + 4\varepsilon^2 - 4E\varepsilon}\;;\;|E| < B. \tag{6.37}$$

Hàm $\rho\,(1\,;\,E)$ (6.37) có thể có cực đại. Đạo hàm biểu thức này, rồi cho bằng không, ta xác định được giá trị năng lượng ứng với cực đại là

$$E_r = 4\varepsilon\,B^2/\left(B^2 + 4\varepsilon^2\right). \tag{6.38}$$

Năng lượng E_r nằm trong vùng phổ liên tục. Nó có thể xem là năng lượng cộng hưởng nếu cực đại của $\rho\,(1\,;\,E)$ ở đó là đủ nhọn.

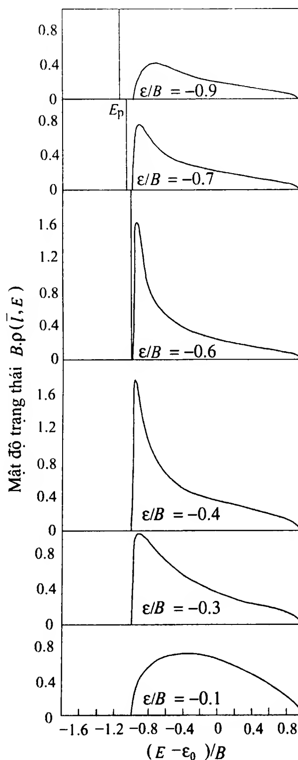
Trên hình 6.3, ta minh họa định tính dáng điệu của $\rho\,(E)$ khi $|\varepsilon|$ tăng dần từ 0. Ta xét trường hợp nhiễu loạn hút, $\varepsilon < 0$. Năng lượng E_r (6.38) có cùng dấu với ε và $|E_r|$ tăng cùng với $|\varepsilon|$. Như vậy, khi $|\varepsilon|$ tăng, E_r dịch xa dần tâm vùng, đi về phía ngưỡng dưới E_D, mật độ trạng thái bị kéo về phía năng lượng thấp với cực đại ngày càng nhọn. Khi $|\varepsilon| = 0.4B$, cực đại của $\rho\,(E)$ tại E_r trở nên rất nhọn, thể hiện rõ tính cộng hưởng. Khi $|\varepsilon|$ đạt giá trị ngưỡng, $|\varepsilon| = |I_D|^{-1} = B/2$, năng lượng cộng hưởng E_r trùng với ngưỡng dưới E_D. Ngay khi $|\varepsilon|$ vượt qua giá trị ngưỡng $B/2$, một phần của đỉnh cộng hưởng tách ra khỏi vùng phổ liên tục, tạo thành một phổ dạng delta ở phía dưới ngưỡng E_D: một mức liên kết đã xuất hiện ! Trọng khối $|b_l|^2$ của mức liên kết này được đánh giá bằng (6.11). Thay $G_0\,(1,\,1;\,E)$ (6.33) vào (6.11), được

$$|b_l|^2 = \sqrt{E_p^2 - B^2}/|\varepsilon| = \left(4\varepsilon^2 - B^2\right)/4\varepsilon^2. \tag{6.39}$$

Để nhận được kết quả này ta đã sử dụng các hệ thức (6.7) và E_p (6.36).

Cường độ $|\varepsilon|$ càng lớn thì $|E_p|$ (6.36) cũng càng lớn, nghĩa là mức liên kết càng thấp so với ngưỡng dưới E_D. Đồng thời, trọng khối (6.39) càng lớn. Song song với quá trình đó, bên trong vùng liên tục, mật độ trạng thái chuyển ngược lại, dần về tâm vùng, cực đại cộng hưởng thấp dần, rồi mờ

hẳn đi không còn nhận ra nữa.



Hình 6.3: Mật độ trạng thái biểu diễn theo năng lượng cho các giá trị khác nhau của ε. Tại giá trị ngưỡng $|\varepsilon| = B/2$ một mức gián đoạn tách ra.

Nếu nhiễu loạn là đẩy, $\varepsilon > 0$, thì một bức tranh hoàn toàn tương tự sẽ xảy ra ở lân cận ngưỡng trên E_U của vùng liên tục.

6.2.2 Hệ hai chiều: Mạng vuông

Như đã chỉ ra trên hình 5.2, mật độ trạng thái của hệ hai chiều liên kết mạnh với Hamiltonian tuần hoàn $\mathcal{H}_0$ có gián đoạn ở các ngưỡng vùng:

$$\rho_0\,(1{:}\ E) \xrightarrow[E \to E_D + 0]{} \rho_D .$$

Ở đây, để cụ thể ta nói về ngưỡng dưới. Bức tranh vật lý ở hai ngưỡng là đối xứng.

Cùng với sự gián đoạn của $\rho_0\,(E)$, hàm Green có phân kỳ logarit tại các ngưỡng

$$G_0\,(1,1;\ E) \xrightarrow[E \to E_D]{} \rho_D \ln\frac{|E - E_D|}{C} \xrightarrow[E \to E_D]{} -\infty, \qquad (6.40)$$

trong đó C là một hằng số dương. Tương ứng với hàm Green (6.40), đại lượng $|I_U|$ là lớn vô hạn. Thành thử với mọi ε, dù $|\varepsilon|$ nhỏ bao nhiêu chăng nữa, đường $1/\varepsilon$ luôn nằm cao hơn $I_U < 0$ và do đó luôn cắt $G_0\,(1.\ 1{:}\ E)$ tại một (và chỉ một) điểm. Và như vậy, ta đã đi đến một kết luận quan trọng: trong các hệ hai chiều dù nhiễu loạn nhỏ bao nhiêu chăng nữa, ta luôn có một trạng thái liên kết. Ta đánh giá vị trí E_p của trạng thái này.

Với $|\varepsilon|$ nhỏ, đường $1/\varepsilon$ nằm thấp và cắt đường $G_0\,(E)$ tại điểm E_p rất gần E_D. Trong trường hợp này, để xác định E_p ta có thể gần đúng sử dụng dạng tiệm cận của hàm Green (6.40). Phương trình xác định mức liên kết E_p có dạng

$$\rho_D \ln\frac{|E_p - E_D|}{C} = -1/|\varepsilon|.$$

Lời-giải là

$$|E_p - E_D| \approx C \exp\left(-1/|\varepsilon|\,\rho_D\right). \qquad (6.41)$$

Như vậy, với nhiễu loạn yếu ($|\varepsilon| \ll B$) năng lượng liên kết của mức gián đoạn (tức là khoảng cách từ mức tới đáy vùng E_D) $E_B = |E_p - E_D|$ phụ

thuộc vào $|\varepsilon|$ theo hàm e mũ (6.41). Dáng điệu của sự phụ thuộc này là hệ quả của tính phân kỳ (6.40) của hàm Green ở ngưỡng vùng. Bởi lẽ tính phân kỳ logarit là tính chất chung của các hệ hai chiều, kết quả (6.41) cũng là tổng quát cho mọi mạng hai chiều.

Xét cụ thể mạng vuông, ta có thể đánh giá E_B một cách định lượng hơn. Thật vậy, trong giới hạn $E \to \varepsilon_0 - B$ (ngưỡng dưới) hàm Green trong mạng vuông (5.27), (5.28) tiệm cận về

$$G_0(1, 1; E) \xrightarrow[E \to \varepsilon_0 - B]{} \frac{1}{\pi B} \ln\left(\frac{|E - \varepsilon_0 + B|}{8B}\right). \tag{6.42}$$

So sánh biểu thức này với (6.40) ta xác định được $\rho_D = 1/\pi B$ và $C = 8B$. Và do đó, trong mạng vuông năng lượng liên kết (6.41) có dạng

$$\begin{aligned} E_B &= |E_p - E_D| \\ &\approx 8B \exp(-\pi B/|\varepsilon|); \quad \varepsilon \to 0_- . \end{aligned} \tag{6.43}$$

Sử dụng hàm Green đơn giản (5.30) ta có thể mô tả sự xuất hiện của mức liên kết cũng như dáng điệu tổng thể của mật độ trạng thái trong sự phụ thuộc vào ε bằng sơ đồ tương tự như ở hình 6.3. Ngoài ra, một điều đáng giới thiệu là, nếu trong (6.41) ta thay đồng thời $\rho_D = \rho_0 \Omega_0$ và $|\varepsilon| = V_0$ thì ta nhận lại kết quả (4.44) $E_0 \propto \exp(-1/\rho_0 V_0 \Omega_0)$, xác định vị trí mức gián đoạn trong bài toán hạt tự do tán xạ bởi một hố thế nông.

6.2.3 Hệ một chiều

Trong mạng một chiều ở gần ngưỡng vùng mật độ trạng thái phân kỳ dạng (xem hình 5.1)

$$\rho(1; E) \xrightarrow[E \to E_D + 0]{} C(E - E_D)^{-1/2}.$$

Tương ứng, hàm Green cũng phân kỳ

$$G_0(1, 1; E) \xrightarrow[E \to E_D - 0]{} -\pi C(E_D - E)^{-1/2} \to -\infty. \tag{6.44}$$

Hệ quả là, cũng giống như trong hệ hai chiều, các đại lượng $|I_D|$, I_U lớn vô hạn, và đường $1/\varepsilon$ luôn cắt $G_0\,(1, 1;\, E)$ tại một (và chỉ một) điểm dù cho $|\varepsilon|$ nhỏ bao nhiêu chăng nữa. Nói khác, trong hệ một chiều nhiễu loạn bất kỳ, dù nhỏ bao nhiêu chăng nữa, cũng sinh ra trạng thái liên kết.

Vị trí của mức liên kết E_p có thể đánh giá bằng cách quen thuộc dựa trên phương trình (6.7). Với $|\varepsilon|$ nhỏ, khi E_p nằm rất gần E_D, ta có thể sử dụng dạng tiệm cận của hàm Green (6.44). Đặt hàm này vào (6.7), có:

$$-\pi C\,(E_D - E)^{-1/2} = -\,1/|\varepsilon|.$$

Từ đây suy ra năng lượng liên kết

$$E_B = |E_p - E_D| \xrightarrow[\varepsilon \to 0_-]{} \varepsilon^2\,\pi^2\,C^2. \tag{6.45}$$

Kết quả này sẽ trùng chính xác với biểu thức (4.46) của năng lượng liên kết E_0 trong bài toán hạt tự do một chiều tán xạ bởi hố thế nông, nếu đồng thời thay $|\varepsilon| = V_0$ và $C^2 = m\Omega_0^2/2\hbar^2\pi^2$.

Việc xem xét các trạng thái cộng hưởng trong các hệ một chiều đòi hỏi một cách thức riêng. Thay vì tiết diện tán xạ vi phân (6.21), ta sẽ xem xét hai đại lượng gọi là hệ số truyền qua $|t|^2$ và hệ số phản xạ $|r|^2$, định nghĩa tương ứng là:

$$\left.\begin{aligned} |t|^2 &= 1/|1 - \varepsilon\, G_0\,(1, 1;\, E)\,|^2 \\ |r|^2 &= |\varepsilon\, G_0\,(1, 1;\, E)\,|^2/|1 - \varepsilon\, G_0\,(1, 1;\, E)\,|^2\,. \end{aligned}\right\} \tag{6.46}$$

Lưu ý là trong hệ một chiều, hàm Green $G_0\,(1, 1;\, E)$ là thuần ảo bên trong vùng liên tục (hình 5.1). Do đó, các hệ số (6.46) thỏa mãn điều kiện:

$$|t|^2 + |r|^2 = 1\ .$$

Với (6.46), mật độ trạng thái (6.14) viết được dưới dạng

$$\rho\,(1;\, E) = \rho_0\,(1;\, E)\ |t|^2. \tag{6.47}$$

Và, biên độ trạng thái (6.20):

$$|\,\langle 1|\psi_E\rangle\,|^2 = |t|^2/N. \tag{6.48}$$

Các biểu thức (6.47) và (6.48) cho thấy rằng, trạng thái cộng hưởng, nếu có, tất nhiên được quy định bởi dáng điệu phụ thuộc vào E của $|t|^2$. Vì $|t|^2 < 1$, nên cộng hưởng xảy ra, nếu $|t(E)|^2$ có giá trị gần bằng 1 ở lân cận một năng lượng nào đó và giảm nhanh khi ra xa năng lượng này. Trong thực tế, không phải ở bài toán một chiều nào $|t(E)|^2$ cũng có dáng điệu như vậy. Nói khác, trong các hệ một chiều không phải khi nào cũng có trạng thái cộng hưởng. Để minh họa cho nhận xét này, ta trở lại mô hình liên kết mạnh một chiều với hàm Green (5.22):

$$G_0(1, 1; E) = \left(E^2 - B^2\right)^{-1/2}. \qquad (6.49)$$

(xem $\varepsilon_0 = 0$). Vị trí trạng thái liên kết khi đó là

$$E_p = q(\varepsilon)\sqrt{B^2 + \varepsilon^2}.$$

(hàm $q(x)$ định nghĩa trong 2.3.2) và hệ số truyền qua (6.46) bằng

$$|t|^2 = \frac{(B^2 - E^2)}{(B^2 + \varepsilon^2 - E^2)}. \qquad (6.50)$$

Rõ ràng là hàm $|t(E)|^2$ (6.50) không hề có cấu trúc cộng hưởng. Nghĩa là, trong mô hình liên kết mạnh một chiều với hàm Green (6.49) không tồn tại trạng thái cộng hưởng.

Kết luận quan trọng nhất rút ra từ ba trường hợp khảo sát ở trên là, trong khi ở các hệ một và hai chiều trạng thái liên kết luôn được tạo thành cho dù cường độ nhiễu loạn nhỏ bao nhiêu chăng nữa, thì với các hệ ba chiều để có trạng thái liên kết cường độ nhiễu loạn $|\varepsilon|$ cần phải lớn hơn một giá trị ngưỡng nào đó. Để minh họa kết luận quan trọng này ta xem xét một mô hình đơn giản. Giả sử trong không gian D chiều có một hố thế sâu $|\varepsilon|$ với kích thước mỗi chiều là a. Để giữ một hạt khối lượng m định xứ trong miền không gian kích thước L xung quanh hố thế, thì thế năng giam giữ

$$W_c \propto \int V(r)\,|\psi|^2\,d^D r \approx |\varepsilon|\,(a/L)^D$$

phải vượt quá động năng

$$W_k \propto \frac{p^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2mL^2}.$$

Nếu $|\varepsilon|$ là nhỏ, L là lớn, thì so sánh hai đại lượng trên ta thấy luôn có

$$\begin{aligned} W_c &\gg W_k \text{ nếu số chiều } D < 2, \\ W_c &\ll W_k \text{ nếu số chiều } D > 2, \end{aligned}$$

nghĩa là, với hệ một chiều ($D < 2$) hạt luôn bị giam giữ ở lân cận hố thế, còn với hệ ba chiều ($D > 2$) hạt không bị giam giữ nếu $|\varepsilon|$ là nhỏ. Mô hình đơn giản trên không cho chính kiến gì về trường hợp hệ hai chiều. Dù rằng ở trên ta đã khẳng định rằng trong hệ hai chiều trạng thái liên kết cũng luôn xuất hiện dù $|\varepsilon|$ nhỏ, trong thực tế, các tính chất (định xứ hay lan truyền) của hệ electron hai chiều vẫn là vấn đề đang bàn cãi (xem, chẳng hạn, Abrahams *et al.* 2001).

Cuối cùng, cũng cần giới thiệu thêm rằng, Hamiltonian liên kết mạnh trình bày trong chương này là mô hình đơn giản nhất để nghiên cứu các tính chất electron của vật rắn tinh thể khi có mặt một tâm tạp. Tuy rất đơn giản, mô hình này đã cho phép mô tả những đặc trưng vật lý quan trọng nhất của bài toán. Nếu muốn biết các đặc trưng định lượng của các cấu trúc tinh thể thực, thì nhiều yếu tố khác cần phải được tính đến, như là: (i) ở mỗi nguyên tử nút mạng có thể tồn tại đồng thời nhiều quỹ đạo electron, (ii) dạng cụ thể của thế tạp, (iii) ảnh hưởng của tâm tạp đến sự sắp xếp các ion mạng chủ xung quanh. Tính đến các yếu tố này, bài toán sẽ trở nên phức tạp hơn nhiều. Ví như, để tính đến dạng cụ thể của thế tạp ta thường phải đồng thời giải phương trình Poisson và tính hàm Green một cách tự hợp: xuất phát từ một dạng thế giả thiết ban đầu, tính hàm Green, xác định mật độ điện tích; với mật độ điện tích này giải phương trình Poisson để tính lại thế; dùng thế nhận được tính lại hàm Green... Tất nhiên, các tính toán như vậy chỉ có thể thực thi bằng máy tính điện tử. Độc giả nào quan tâm đến các phương pháp tính số trong khoa học vật liệu có thể tham khảo, chẳng hạn, cuốn sách của Ohno và đồng tác giả. (Ohno *et al.* 1999). Trong khuôn khổ cuốn sách này, chúng tôi chỉ hạn chế ở giới thiệu một số khảo sát định tính, chủ yếu tập trung vào bản chất vật lý của vấn đề.

6.3 Áp dụng: cặp Cooper và siêu dẫn

Những kết quả chính của lý thuyết siêu dẫn BCS (Bardeen, Cooper, and Schrieffer 1957) có thể tóm tắt là: (1) sự hút giữa các electron dẫn đến hiệu ứng ghép cặp (cặp Cooper); Trạng thái cơ bản của hệ các cặp Cooper tách khỏi các trạng thái kích thích bằng một khe (gap):

$$\Delta \approx 2\,\hbar\omega_D \exp\left(-\,1/V\rho_F\right);\; V\rho_F \ll 1. \tag{6.51}$$

trong đó ρ_F là mật độ trạng thái ở mức Fermi, V là cường độ thế hút trong Hamiltonian BCS, $\mathcal{H} = \sum \varepsilon_k \left(c_k^+ c_k + c_{-k}^+ c_{-k}\right) - V \sum \left(c_{k'}^+ c_{-k'}^+ c_{-k} c_k\right)$; ω_D là tần số Debye; (2) tương tác electron phonon là nguyên nhân gây ra sự hút, sự ghép cặp electron; (3) hiệu ứng Meissner là một tính chất của trạng thái cơ bản; và (4) nhiệt độ tới hạn T_c phụ thuộc vào hai tham số chính ρ_F và V. Với $V\rho_F \ll 1$ ta có

$$k_B T_c \approx 1.14\,\hbar\omega_D \exp\left(-\,1/V\rho_F\right). \tag{6.52}$$

Lý thuyết BCS là một lý thuyết nhiều hạt và do đó, việc xem xét nó vượt khỏi khuôn khổ của cuốn sách này. Ở đây, chúng tôi chỉ muốn minh họa một điều là, ngay trong phạm vi lý thuyết hàm Green một hạt của mô hình tán xạ đơn tạp, ta cũng có thể gần đúng nhận được những hệ thức quan trọng nhất, (6.51) và (6.52), của lý thuyết BCS.

Xét một hệ các fermion khối lượng m, tương tác cặp với nhau bằng thế hút

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{với } r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| < a\,. \\ 0 & \text{với } r > a\,. \end{cases} \tag{6.53}$$

Ta sẽ quan tâm đến chuyển động của một cặp hạt, bỏ qua tương tác của cặp với tất cả các hạt còn lại trong hệ. Đồng thời, nguyên lý Pauli không cho phép bất kỳ hạt nào trong cặp được chiếm một trạng thái đã bị choán đầy.

Khi không có tương tác hút (6.53) hàm riêng của cặp bằng tích các hàm riêng của các hạt riêng rẽ, $|\mathbf{k}_1, s_1; \mathbf{k}_2, s_2\rangle$, trong đó cả hai momentum $\mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_2$ đều nằm ngoài biển Fermi, đã bị choán đầy bởi các hạt khác; s_1, s_2 là các spin của các hạt.

Khi tính đến tương tác (6.53) Hamiltonian của cặp có thể viết dưới dạng

$$\mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_{CM} + \mathcal{H}_r = \frac{\hbar^2 K^2}{2M} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + V(r). \tag{6.54}$$

Ở đây, $\mathcal{H}_{CM} = \hbar^2 K^2/2M$ mô tả chuyển động của khối tâm (center of mass) với $M = 2m$; $\mathcal{H}_r$ là Hamiltonian chuyển động tương đối với $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ và $\mu = m_1 m_2/(m_1 + m_2) = m/2$. Momentum toàn phần $\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ là một số lượng tử tốt của bài toán $\mathcal{H}_{12}$. Phép chuyển đổi (6.54) dẫn bài toán với Hamiltonian H_{12} về bài toán chỉ với Hamiltonian $\mathcal{H}_r = -(\hbar^2/2\mu)\nabla_r^2 + V(\mathbf{r})$. Đây là bài toán một hạt khối lượng μ bị tán xạ bởi thế $V(r)$. Như đã thấy ở trên, lời giải của bài toán này được hoàn toàn xác định bởi hàm Green không nhiễu loạn, hay tương đương, bởi mật độ trạng thái không nhiễu loạn $\rho_0(E;\mathbf{K})$, tính trong đơn vị thể tích của một cặp không tương tác với momentum tổng cộng $\mathbf{K}$:

$$\rho_0(E;\mathbf{K}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\mathbf{k}\delta(E - \varepsilon(k_1) - \varepsilon(k_2))$$
$$\theta(\varepsilon(k_1) - E_F)\,\theta(\varepsilon(k_2) - E_F). \tag{6.55}$$

Ở đây, $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)/2$ là momentum chuyển động tương đối, đồng thời các momentum $\mathbf{k}_1$ và $\mathbf{k}_2$ cần được thay tương ứng bằng $(\mathbf{K}/2) + \mathbf{k}$ và $(\mathbf{K}/2) - \mathbf{k}$. Hai hàm θ dưới dấu tích phân ngụ ý rằng, cả hai electron trong cặp đều không thể chiếm các trạng thái với năng lượng thấp hơn E_F. Nếu nhiệt độ là hữu hạn thì tích hai hàm này sẽ được thay thế bằng $(1 - f(\varepsilon(k_1)))$ $(1 - f(\varepsilon(k_2)))$ với $f(\varepsilon)$ là hàm phân bố Fermi.

Nhìn vào (6.55) ta thấy, rõ ràng là sự có mặt của biển Fermi đã làm thay đổi hẳn dáng điệu của mật độ trạng thái không nhiễu loạn $\rho_0(E)$. Do có biển này nên, theo (6.55),

$$\rho_0(E;\mathbf{K}) = 0 \quad \text{với} \quad E < 2E_F. \tag{6.56}$$

Trong khi đó, với cặp có $\mathbf{K} = 0$ biểu thức (6.55) cho

$$\rho_0(E;0) = \frac{1}{2}\rho(E/2)\,\theta(E/2 - E_F), \tag{6.57}$$

ở đây $\rho(E/2)$ là mật độ trạng thái tính trên đơn vị thể tích của một hạt không tương tác với năng lượng $E/2$ và định hướng spin đã cho. Trong giới hạn $E \to 2E_F$, hệ thức (6.57) dẫn về

$$\rho_0(E;0) \xrightarrow[E \to 2E_F+0]{} \frac{1}{2}\rho_F, \tag{6.58}$$

với $\rho_F \equiv \rho(E_F)$ là mật độ trạng thái tại năng lượng Fermi.

Mặt khác, tất nhiên là với cặp có $\mathbf{K} \neq 0$

$$\rho_0(E;\mathbf{K}) \xrightarrow[E \to 2E_F+0]{} 0\ ;\ \mathbf{K} \neq 0. \tag{6.59}$$

Thành thử, chỉ với những cặp có $\mathbf{K} = 0$, tức $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$, mật độ trạng thái mới có gián đoạn $\rho_F/2$ (6.58) ở $E = 2E_F$. Với các cặp khác mật độ trạng thái liên tục tại $2E_F$ ((6.56) và (6.59)). Theo hình thức luận chung thảo luận ở hai tiết trên, một khi mật độ trạng thái có gián đoạn hữu hạn ở ngưỡng vùng thì một trạng thái liên kết sẽ được tạo thành cho dù cường độ nhiễu loạn nhỏ bao nhiêu chăng nữa. Năng lượng liên kết của trạng thái này là (6.41):

$$E_B(0) = C\exp\left(-2/V_0\rho_F a^3\right), \tag{6.60}$$

(a là kích thước của hố thế). Với các cặp có $\mathbf{K} \neq 0$, nếu có các trạng thái liên kết, thì năng lượng liên kết $E_B(\mathbf{K})$ của các trạng thái này đều nhỏ hơn $E_B(0)$ (6.60). Một cách định tính, đây chính là bức tranh về các cặp Cooper (Cooper 1956) trong lý thuyết BCS.

Ta cần nhấn mạnh rằng, trạng thái liên kết (6.60) là hệ quả của sự gián đoạn trong mật độ trạng thái đối với chuyển động tương đối của cặp hạt có $\mathbf{K} = 0$. Sự gián đoạn này lại là hệ quả của sự tồn tại biển Fermi, làm cho các trạng thái cặp với năng lượng thấp hơn $2E_F$ là không cho phép. Vậy là, khi có mặt một tương tác hút, hệ các fermion sẽ đạt trạng thái với năng lượng thấp nhất khi các hạt được ghép cặp hoàn toàn và mỗi cặp có momentum toàn phần $\mathbf{K} = 0$. Và như vậy, ở trạng thái cơ bản, hệ các cặp trở nên ngưng đọng lượng tử (quantum condensation). Khi đó không thể có

các kích thích cặp độc lập. Các kích thích năng lượng thấp hoặc là liên quan với các fermion riêng rẽ của các cặp bị phá vỡ, hoặc là các thăng giáng mật độ tập thể. Trong điều kiện như vậy, theo Landau và Lifshitz (Landau and Lifshitz 1958), từ yêu cầu về bảo toàn năng lượng và momentum suy ra rằng, các kích thích cơ bản không thể xuất hiện ở các hệ "ngưng đọng" chuyển động chậm. Do đó, một hệ như vậy phải hoặc là siêu chảy (superfluid) hoặc là siêu dẫn (superconducting).

Như vậy, chỉ bằng một mô hình đơn giản, ta đã đi đến bức tranh định tính về trạng thái siêu dẫn, liên quan với sự tạo thành các cặp Cooper, trong đó biểu thức (6.60) chính là khe năng lượng giữa trạng thái cơ bản và các trạng thái cặp kích thích. Tuy nhiên, về định lượng, giữa (6.60) và (6.51) có khác nhau ở hệ số 2 trong số mũ. Sự khác nhau này có thể lý giải nếu để ý rằng, trong thảo luận ở trên ta đã bỏ qua tính đồng nhất của các electron khi tách một electron ra khỏi biển các hạt khác và xem các hạt trong biển là hoàn toàn thụ động, chỉ đóng vai trò bảo đảm cho nguyên lý Pauli không bị vi phạm. Thực ra, một electron trong biển có thể nhảy lên, bỏ lại đằng sau một "lỗ trống" và electron mà ta đang xem xét có thể nhảy vào lỗ trống này. hai electron đánh đổi vai trò cho nhau! Ta gọi quá trình này là "gián tiếp", còn quá trình tương ứng với (6.60) là "trực tiếp". Đối với các cặp Cooper ($\mathrm{K} = 0$), quá trình gián tiếp là quá trình hai electron nào đó trong biển Fermi nhảy lên các mức nào đó, để lại hai lỗ trống cho cặp electron mà ta đang xem xét nhảy vào. Quá trình này cho đóng góp vào mật độ trạng thái cặp một lượng bằng $(1/2)\,\rho\,(E/2)\,f\,(E/2)\,f\,(E/2)$. Phụ phần này vào mật độ trạng thái ứng với quá trình trực tiếp: $(1/2)\,\rho\,(E/2)\,(1-f\,(E/2))\,(1-f\,(E/2))$ ta được mật độ trạng thái toàn phần:

$$\rho_0\,(E;\,0) = \frac{1}{2}\rho\,(E/2)\,(1-f\,(E/2))\,. \tag{6.61}$$

Mật độ này có gián đoạn ρ_F (thay cho $(1/2)\,\rho_F$ ở (6.58)), và năng lượng liên kết tương ứng sẽ là $\propto \exp\left(-\,1/V_0\rho_F a^3\right)$, phù hợp với (6.51) (chi tiết hơn, có thể xem Economou 1983).

Ta chuyển sang đánh giá nhiệt độ tới hạn của trạng thái siêu dẫn. Đó chính là nhiệt độ cần thiết để trạng thái liên kết có thể xuất hiện.

Sử dụng hệ thức giữa mật độ trạng thái và hàm Green (2.23):

$$G_0(E;0) = \int dE' \frac{\rho_0(E';0)}{E - E'}. \tag{6.62}$$

ta có thể tính hàm Green bằng cách thay vào đây $\rho_0(E';0)$ (6.61). Các cận tích phân ở đây là $2E_F - 2\hbar\omega_D$ và $2E_F + 2\hbar\omega_D$, vì chỉ trong khoảng này của năng lượng cặp, thế tương tác hút mới khác không (ω_D là tần số Debye). Thay (6.61) vào (6.62), tính tích phân với hai cận vừa nêu trên, gần đúng xem $\rho(E/2) \approx \rho_F$ và $\hbar\omega_D/k_BT \gg 1$, ta có:

$$G_0(2E_F;0) = -\rho_F \ln(2e^{\gamma}\hbar\omega_D/\pi k_BT). \tag{6.63}$$

trong đó $\gamma \approx 0.577$ là hằng số Euler.

Đặt (6.63) vào phương trình xác định trạng thái liên kết (6.7), ta có

$$G_0(2E_F;0) = 1/V_0. \tag{6.64}$$

Phương trình (6.64) có lời giải ở mọi $T \leq T_c$, với

$$T_c = \frac{2e^{\gamma}}{\pi}\frac{\hbar\omega_D}{k_B}\exp\left(-1/\rho_F V_0 a^3\right). \tag{6.65}$$

Nhiệt độ T_c (6.65) chính là nhiệt độ tới hạn để xuất hiện siêu dẫn, nhận được trong mô hình đơn giản một cặp với thế hút (6.53). Điều đáng nói là (6.65) trùng tốt với kết quả của lý thuyết nhiều hạt BCS (6.52).

Cuối cùng, ta bàn luận thêm về bản chất của thế hút V_0. Rõ ràng là, nơi duy nhất ta có thể tìm nguồn gốc của thế hút là môi trường phân cực xung quanh cặp electron. Ta có thể giả thiết rằng, tương tác hút V giữa hai electron tỷ lệ với tương tác của mỗi electron với môi trường phân cực, V_{e-m}, và đồng thời tỷ lệ với khả năng phân cực của môi trường:

$$V \sim |V_{e-m}|^2/\hbar\omega_m, \tag{6.66}$$

Ở đây, khả năng phân cực của môi trường được xem là tỷ lệ nghịch với tần số riêng điển hình của nó, ω_m. Với đa phần các hệ siêu dẫn trong thực tế, môi trường phân cực là các mạng ion, và do đó, thế V_{e-m} không phải gì

khác mà chính là tương tác electron-phonon, V_{e-ph}, còn ω_m chính là tần số phonon điển hình, có thể lấy bằng tần số Debye ω_D. Để ý là, V_{e-ph} phụ thuộc vào momentum của mỗi electron, nên đại lượng $|V_{e-m}|^2 \equiv |V_{e-ph}|^2$ trong (6.66) cần được lấy trung bình trên bề mặt Fermi: $\langle V_{e-ph}^2 \rangle$. Ngoài ra, tham gia vào (6.66) thực ra không chỉ có một tần số mạng, mà là một miền tần số với phân bố đặc trưng $F(\omega)$ nào đó. Tổng hợp các thảo luận trên, ta viết thế tương tác (6.66) dưới dạng

$$V \sim \int d\omega\, F(\omega) \frac{\langle V_{e-ph}^2 \rangle}{\hbar\omega} . \tag{6.67}$$

Ngoài ra, ta cũng có thể biểu diễn đại lượng $\nu = \rho_F V_0 a^3 \equiv \rho_F \int V d\mathbf{r}$ trong số mũ của T_c (6.65) dưới dạng

$$\begin{aligned} \nu &= \rho_F \int d\omega F(\omega) \frac{1}{\hbar\omega} \int \langle V_{e-ph}^2 \rangle\, d\mathbf{r} \\ &= 2 \int d\omega F(\omega) \frac{\alpha^2(\omega)}{\omega}, \end{aligned} \tag{6.68}$$

với $\alpha^2(\omega) = (\rho_F/2\hbar) \int d\mathbf{r} \langle V_{e-ph}^2 \rangle$.

Từ các kết quả (6.67) và (6.68) ta có một số nhận xét. Một là, theo (6.67), tương tác V tỷ lệ với $\langle V_{e-ph}^2 \rangle$, trong khi chính V_{e-ph} lại mô tả tán xạ của electron lên mạng tinh thể nguyên nhân gây ra điện trở của kim loại. Vậy, ta có thể dự đoán: kim loại có điện trở suất ở nhiệt độ phòng càng cao, càng dễ trở thành siêu dẫn. Hai là, theo (6.67) thì kim loại nào càng có nhiều phonon tần số thấp, thế V càng lớn. Vì các kim loại mềm (soft), kém ổn định, thường có ω thấp, nhận xét trên dự đoán: các kim loại mềm, kém ổn định dễ trở thành siêu dẫn hơn.

Điều đáng nói là, cả hai dự đoán trên đều phù hợp với những gì quan sát được ở các hệ thực. Các vật liệu có T_c cao thường kém bền vững về cấu trúc.

Thảo luận bổ sung và bài tập

B6.1 Bài toán Kondo. Ở hầu hết các kim loại, điện trở giảm khi hạ nhiệt độ. Điều này liên quan với sự giảm biên độ dao động nhiệt của các ion nút mạng. Nhưng ở một số kim loại có chứa các tạp từ, ở nhiệt độ đủ thấp, điện trở lại tăng khi hạ nhiệt độ. Kondo (Kondo 1964) xem xét hệ các electron không tương tác, tán xạ spin với các moment từ địa phương (tạp) và đã phát hiện rằng, những đóng góp bậc hai của tán xạ vào điện trở quả là tăng (theo dạng logarit) khi nhiệt độ T giảm. Trong sự phụ thuộc của điện trở vào nhiệt độ có một cực điểm tại $T = T_m$: với $T \gg T_m$, điện trở tăng cùng với T; với $T \ll T_m$, điện trở tăng khi T giảm. Cực tiểu như vậy đã quan sát thấy ở nhiều kim loại như Cu, Ag, Au, Mg, Zn với tạp Cr, Mn, Fe, Mo hay Re. Hiện tượng điện trở tăng khi T giảm như vậy có thể hiểu được trong khuôn khổ mô hình tán xạ đơn tạp bằng cách hoàn toàn tương tự như với bài toán siêu dẫn ở tiết 6.3.

Giả sử rằng, tại nút 1 có một moment từ địa phương (tạp từ) với thế tán xạ dạng

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_1 &= -J\left(|l\downarrow\rangle S_+ \langle l\uparrow| + |l\uparrow\rangle S_- \langle l\downarrow| + \right.\\ &\qquad \left. |l\uparrow\rangle S_z \langle l\uparrow| - |l\downarrow\rangle S_z \langle l\downarrow|\right).\end{aligned}$$

Ở đây mũi tên chỉ phương của spin electron; $S_+ = S_x + iS_y$, $S_- = S_x - iS_y$, và S_z là các thành phần của moment spin địa phương (tạp); J là hằng số tương tác (xem tiết 8.1).

Như vậy, về bản chất ta có bài toán tương tác của electron với tâm tạp. Mật độ trạng thái không nhiễu loạn là $2\rho(1-f)$. Mật độ này có gián đoạn $2\rho_F$ và do đó có trạng thái liên kết. Nếu $J < 0$ (phản sắt từ), thì năng lượng liên kết của trạng thái này là

$$E_B = C\,\exp\left(-1/2|J|\rho_F\right).$$

Tương tự như việc đánh giá T_c trong bài toán siêu dẫn, ta cũng có thể chỉ ra rằng, trạng thái liên kết chỉ xuất hiện ở nhiệt độ $T < T_k$ với

$$T_k = \frac{2e^\gamma}{\pi}\frac{D}{k_B}\exp\left(-1/2|J|\rho_F\right),$$

trong đó D liên quan với cận tích phân (đóng vai trò như $\hbar\omega_D$ ở T_c (6.65)). Nhiệt độ T_k gọi là nhiệt độ Kondo, có thể có giá trị nằm trên một dải rộng $10^{-3} \div 10^3 K$, tùy vật liệu. Nhiệt độ Kondo là nhiệt độ ở đó hiệu ứng Kondo đối với sự phụ thuộc nhiệt độ của điện trở trở nên quan trọng. Điều đáng nói là các kết quả về E_B, T_k, đánh giá một cách đơn giản ở trên, phù hợp tốt với kết quả tương ứng của lý thuyết nhiều hạt (xem, chẳng hạn, Mahan 2000).

B6.2 Sử dụng hàm Green không nhiễu loạn dạng (5.30)

$$G_0(1, 1; \eta) = \frac{1}{2B} \ln \frac{\eta - \varepsilon_0 + B}{\eta - \varepsilon_0 - B}$$

và mật độ trạng thái tương ứng (5.31)

$$\rho_0(1; E) = \frac{1}{2B} \theta(B - |E - \varepsilon_0|),$$

hãy tính mật độ trạng thái nhiễu loạn $\rho(1; E)$ cho mạng vuông trong mô hình liên kết mạnh với tán xạ đơn tạp. Thảo luận dáng điệu của $\rho(1; E)$ ở những giá trị khác nhau của cường độ nhiễu loạn $|\varepsilon|$.

Chương 7

Các hệ không trật tự

Trong vài chục năm gần đây, các hệ ngưng đọng không trật tự đã trở thành đối tượng nghiên cứu rất hấp dẫn. Điều này không chỉ liên quan đến khả năng ứng dụng to lớn của chúng, mà còn vì, thực ra, hầu hết các đối tượng ta gặp hàng ngày đều là "không trật tự", trong khi các cấu trúc tinh thể hoàn hảo thường chỉ là các hệ lý tưởng. Trong vật lý, khái niệm "hệ không trật tự" bao hàm một diện rộng các vật liệu như kim loại hay bán dẫn pha tạp, kim loại lỏng, vật liệu vô định hình, vật liệu xốp, composite, gốm... (Ziman 1979). Trong các hệ không trật tự, do không còn đối xứng dịch chuyển, tất cả những đặc trưng vật lý là hệ quả của tính chất này (bức tranh giả hạt với momentum và định luật tán sắc, cấu trúc vùng đơn giản, va chạm và phương trình Boltzmann...) đều trở nên thiếu cơ sở. Các trạng thái định xứ trở nên quan trọng (nhất là trong các hệ thấp chiều). Các hiệu ứng tương quan (correlation) trở nên không thể bỏ qua (Mott and Davis 1979; Lifshitz *et al.* 1979), Tuy nhiên, cũng như trong vật lý các cấu trúc tinh thể lý tưởng, trong vật lý các hệ không trật tự, gần đúng một hạt vẫn đóng vai trò cơ sở, dẫn đến một loạt các khái niệm cơ bản, cho phép dự đoán nhiều đặc trưng quan trọng. Giới hạn ở gần đúng một hạt và chỉ ở các hệ với các yếu tố mất trật tự điểm, phân bố ngẫu nhiên đều, nội dung của chương này tập trung chủ yếu vào việc xem xét độ dẫn điện trong sự phụ thuộc vào mức độ mất trật tự của hệ.

7.1 Bài toán nhiều tâm tạp

Vẫn tiếp tục mô hình mạng như ở chương trước, nhưng bây giờ ta quan tâm đến trường hợp, khi trong hệ có không phải một, mà là một số lớn tâm tạp sắp xếp một cách ngẫu nhiên. Ví dụ đơn giản là hợp chất hai thành phần

(binary mixture) $A_x B_{1-x}$, trong đó một phần x các nút có nguyên tử loại A với năng lượng nút ε_A, phần $1-x$ các nút còn lại có nguyên tử loại B với năng lượng nút ε_B. Ta không biết chính xác nút nào có nguyên tử loại A, nút nào có nguyên tử loại B, mà chỉ có thể nói về xác suất để có một cấu hình nguyên tử nút mạng nào đó. Và như vậy, ta gặp một hệ ngẫu nhiên về cấu trúc - một hệ không trật tự. Ta không biết chính xác Hamiltonian của hệ, mà chỉ biết phân bố xác suất các yếu tố ma trận của nó. Chẳng hạn, trong ví dụ hợp chất hai thành phần ở trên, nếu không có tương quan nào giữa các nút, thì năng lượng nút ε_n tại nút n bất kỳ sẽ tuân theo phân bố:

$$p(\varepsilon_n) = x\,\delta(\varepsilon_n - \varepsilon_A) + (1-x)\,\delta(\varepsilon_n - \varepsilon_B)\,. \tag{7.1}$$

Và, phân bố xác suất của một cấu hình nút $\{A, B\}$ là

$$P(\{\varepsilon_n\}) = \prod_n p(\varepsilon_n)\,. \tag{7.2}$$

Trong các hệ ngẫu nhiên, điều ta quan tâm không phải là giá trị của các đại lượng vật lý tính cho một cấu hình cụ thể nào, mà là giá trị trung bình của chúng lấy theo tất cả các cấu hình có thể. Chẳng hạn, ta sẽ quan tâm đến giá trị trung bình của hàm Green G:

$$\langle G\rangle = \int d\{\varepsilon_n\}\, P(\{\varepsilon_n\})\, G\,. \tag{7.3}$$

Mỗi hàm Green G, tính cho một cấu hình tạp cụ thể, không thể dùng để mô tả các tính chất vĩ mô của hệ. Chỉ có trung bình của hàm Green (7.3) mới liên quan với các đại lượng đo được trong các hệ vật lý thực. Hẳn là việc tính $\langle G\rangle$ không đơn giản, thậm chí nói chung không thể tính chính xác, trừ một số trường hợp riêng, khi $p(\varepsilon_n)$ có dạng đơn giản, thích hợp. Các dạng phân bố $p(\varepsilon_n)$ đơn giản thường gặp nhất là: phân bố hai thành phần (7.1), phân bố chữ nhật (đều):

$$p(\varepsilon_n) = \begin{cases} 1/W & \text{nếu } |\varepsilon_n| < W/2 \\ 0 & \text{nếu } |\varepsilon_n| > W/2\,, \end{cases} \tag{7.4}$$

và phân bố Lorentz:

$$p(\varepsilon_n) = \frac{1}{\pi}\frac{1}{\varepsilon_n^2 + \Gamma^2}\,. \tag{7.5}$$

Ở đây, W hay Γ là các tham số vật lý của bài toán.

Cũng cần nói thêm rằng, mô hình đang thảo luận là đơn giản nhất trong các mô hình hệ không trật tự. Ngay cả vẫn trong khuôn khổ liên kết mạnh, thì cũng còn nhiều yếu tố đã được đơn giản hóa. Chẳng hạn, các yếu tố ma trận không chéo V_{ij} trong Hamiltonian (5.4) cũng có thể là biến ngẫu nhiên (off diagonal disorder), hay có thể tồn tại tương quan gần giữa các nút lân cận (ε_n phụ thuộc vào trạng thái của các nút xung quanh). Dù mô hình đang khảo sát là rất đơn giản, việc tính trung bình của hàm Green $\langle G\rangle$ vẫn không phải là bài toán tầm thường, đòi hỏi phải có các phương pháp gần đúng thích hợp.

Nói chung, các phương pháp gần đúng tính $\langle G\rangle$ trình bày dưới đây đều dựa trên các hệ thức cơ bản giữa G, T với $\mathcal{H}_1$, G_0, như (4.14)

$$G = G_0 + G_0 T G_0 \,,$$

hay (4.4):

$$G = G_0 + G_0 \mathcal{H}_1 G \,.$$

Trung bình hai vế các hệ thức này cho:

$$\langle G\rangle = G_0 + G_0 \langle T\rangle G_0 \,, \qquad (7.6)$$

hay

$$\langle G\rangle = G_0 + G_0 \langle \mathcal{H}_1 G\rangle \,. \qquad (7.7)$$

Các hệ thức trên ngụ ý là việc tính $\langle G\rangle$ có thể quy về tính $\langle T\rangle$ hay $\langle \mathcal{H}_1 G\rangle$.

7.2 Các gần đúng cơ bản

7.2.1 Gần đúng tinh thể thực

Gần đúng tinh thể thực (Virtual Crystal Approximation - VCA) dựa trên hệ thức (7.7) và bản chất của nó là bỏ qua tương quan giữa $\mathcal{H}_1$ và G, xem $\langle \mathcal{H}_1 G\rangle = \langle \mathcal{H}_1\rangle \langle G\rangle$. Khi đó, hệ thức (7.7) chuyển thành

$$\langle G\rangle = G_0 + G_0 \langle \mathcal{H}_1\rangle \langle G\rangle \,. \qquad (7.8)$$

Ở đây, trung bình của nhiễu loạn

$$\langle \mathcal{H}_1 \rangle = \sum_{\ell} \langle \mathcal{H}_\ell \rangle = \sum_{\ell} | 1 \rangle \langle \varepsilon_\ell \rangle \langle 1 | = \langle \varepsilon_\ell \rangle . \tag{7.9}$$

Dấu bằng cuối cùng trong (7.9) suy ra từ tính đồng nhất vĩ mô của hệ, khi đó, $\langle \varepsilon_\ell \rangle$ không phụ thuộc vào l. Ký hiệu $\langle \varepsilon_\ell \rangle = \Sigma$ (năng lượng riêng), từ (7.8) và (7.9) suy ra

$$\langle G(E) \rangle = G_0 + G_0 \Sigma \langle G(E) \rangle ,$$

hay

$$\langle G(E) \rangle = \frac{G_0}{1 - G_0 \Sigma} = \frac{1}{E - \mathcal{H}_0 - \Sigma} . \tag{7.10}$$

Ở đây, ta đã thay $G_0 = (E - \mathcal{H}_0)^{-1}$. Vì $\mathcal{H}_0 + \Sigma = \mathcal{H}_0 + \langle \mathcal{H}_1 \rangle \equiv \langle \mathcal{H} \rangle$, ta viết lại $\langle G(E) \rangle$ dưới dạng

$$\langle G(E) \rangle = \frac{1}{E - \langle \mathcal{H} \rangle} . \tag{7.11}$$

Vế phải của hệ thức này có dạng hàm Green của một hệ mô tả bằng Hamiltonian $\langle \mathcal{H} \rangle$. Đây là một Hamiltonian tuần hoàn nhận được từ $\mathcal{H}$ của hệ khảo sát bằng cách thay thế ε_ℓ ở tất cả các nút mạng bằng một thế trung bình $\Sigma \equiv \langle \varepsilon_\ell \rangle$. Ví dụ, với hệ hai thành phần (7.1) thì $\Sigma = x\varepsilon_A + (1 - x)\varepsilon_B$.

Như vậy, trong gần đúng tinh thể thực, trung bình của hàm Green được tính bằng hàm Green của Hamiltonian tuần hoàn tương ứng. Hệ quả là $\langle G(E) \rangle$ có tính chất như hàm Green của một mạng lý tưởng, và do đó không thể cho các mức gián đoạn (như trong chương 6). Đó cũng là lý do của tên gọi "gần đúng tinh thể thực". Mặc dù gần đúng này làm mất thông tin về các trạng thái gián đoạn, nó vẫn rất hữu ích để nghiên cứu phân bố năng lượng bên trong vùng liên tục. Chẳng hạn, nó mô tả rất tốt sự phụ thuộc của mật độ trạng thái vào nồng độ tạp, cho lời giải hoàn toàn chính xác trong trường hợp hệ hai thành phần. Ngoài ra, vì VCA là rất đơn giản nên rất hay được sử dụng làm gần đúng bậc không trong các phương pháp gần đúng phức tạp hơn.

7.2.2 Gần đúng T-matrận trung bình

Gần đúng T-matrận trung bình (Average T-matrix Approximation - ATA) dựa trên hệ thức (7.6), trong đó $\langle T\rangle$ là trung bình T-matrận của một hệ nhiều tâm tán xạ với $\mathcal{H}_1 = \sum_\ell \mathcal{H}_\ell$. Nói chung T là hàm phức tạp của các t_ℓ-matrận:

$$T = f\left(t_\ell\right). \tag{7.12}$$

trong đó t_ℓ là T-matrận trong bài toán với chỉ một tâm tán xạ ở nút ℓ (xem 6.5)

$$t_\ell = \varepsilon_\ell / \left(1 - \varepsilon_\ell G_0\left(l, l\right)\right) . \tag{7.13}$$

Gần đúng cơ bản trong ATA là xem

$$\langle T\rangle = f\left(\langle t_\ell\rangle\right). \tag{7.14}$$

trong đó $f\left(x\right)$ là chính dạng hàm số ở (7.12), còn $\langle t_\ell\rangle$ được xác định bằng

$$\langle t_\ell\rangle = \Sigma / \left(1 - \Sigma\, G_0\left(l, l\right)\right), \tag{7.15}$$

với $\Sigma = \sum_\ell |\, 1\rangle\, \Sigma\, \langle 1| \equiv \mathcal{H}_{1p}$. Như vậy về bản chất, ATA xem $\langle T\rangle$ chính là T-matrận của bài toán, trong đó Hamiltonian nhiễu loạn $\mathcal{H}_1$ được thay bằng Hamiltonian tuần hoàn $\mathcal{H}_{1p}$: $T = T_p = \Sigma / \left(1 - \Sigma\, G_0\right)$. Thay $\langle T\rangle$ trong (7.6) bằng T_p, ta được

$$\langle G\rangle = G_0\left(1 + \frac{\Sigma G_0}{1 - \Sigma G_0}\right) = \left(E - \mathcal{H}_0 - \Sigma\right)^{-1} \equiv G_0\left(E - \Sigma\right) . \tag{7.16}$$

Trong biến đổi trên, ta đã sử dụng $G_0\left(E\right) = \left(E - \mathcal{H}_0\right)^{-1}$ và xem yếu tố chéo của $\mathcal{H}_0$ là gốc tính năng lượng. Như vậy, trong gần đúng T-matrận trung bình, đại lượng $\langle G\left(E\right)\rangle$ được tính bằng chính G_0 nhưng ở năng lượng $E - \Sigma$. "Năng lượng riêng" Σ được xác định bằng (7.15):

$$\Sigma = \langle t_\ell\rangle / \left(1 + \langle t_\ell\rangle\; G_0\left(1, 1\right)\right) . \tag{7.17}$$

Chẳng hạn, với mô hình hai thành phần thì $\langle t_\ell\rangle = x t_A + \left(1 - x\right) t_B$, trong đó $t_{A(B)} = \varepsilon_{A(B)} / \left(1 - \varepsilon_{A(B)} G_0\right)$.

Trong giới hạn tán xạ yếu $\varepsilon_\ell \to 0$, giữ lại số hạng bậc thấp nhất, (7.17) cho $\Sigma \to \langle \varepsilon_\ell^2\rangle\, G_0\left(1, 1\right)$. Đây là một kết quả chính xác. Nói chung, ATA là một gần đúng tốt trong trường hợp mật độ tạp là thấp.

7.2.3 Gần đúng thế kết hợp

Trở lại hệ thức $G = G_0 + G_0\mathcal{H}_1 G$, viết lại được dưới dạng $G_0^{-1}G = 1 + \mathcal{H}_1 G$. Với "năng lượng riêng" Σ bất kỳ, từ đây ta có:

$$\left(G_0^{-1} - \Sigma\right) G = 1 + (\mathcal{H}_1 - \Sigma)\, G. \qquad (7.18)$$

Nội dung của gần đúng thế kết hợp (Coherent Potential Approximation - CPA) là tìm Σ sao cho

$$G_0^{-1} - \Sigma \equiv G_p^{-1} = \langle G \rangle^{-1}. \qquad (7.19)$$

Khi-đó, (7.18) trở thành

$$G = G_p + G_p\,(\mathcal{H}_1 - \Sigma)\, G. \qquad (7.20)$$

Ta thấy, (7.19) ngụ ý, G_p là hàm Green tương ứng với G_0 và năng lượng riêng Σ. Còn, (7.20) ngụ ý, G_p là hàm Green "không nhiễu loạn" và $(\mathcal{H}_1 - \Sigma)$ là nhiễu loạn. Khi đó, tương tự (7.6) ta có thể viết:

$$\langle G \rangle = G_p + G_p \langle T \rangle G_p = G_p, \qquad (7.21)$$

trong đó T là T-matrận tương ứng với G_p và nhiễu loạn $(\mathcal{H}_1 - \Sigma)$. Dấu bằng thứ hai trong (7.21) chính là do định nghĩa (7.19). Đẳng thức (7.21) đồng nghĩa với

$$\langle T \rangle = 0. \qquad (7.22)$$

Đây chính là phương trình xác định năng lượng riêng Σ. Biết Σ, ta sẽ tính được $\langle G \rangle$ theo (7.19):

$$\langle G(E) \rangle = G_p = \left(G_0(E)^{-1} - \Sigma\right)^{-1} = G_0(E - \Sigma)\ . \qquad (7.23)$$

Hệ thức này có dạng trùng với (7.16), nhưng bây giờ Σ là lời giải của (7.22).

Trong thực tế, trừ số ít trường hợp đơn giản, nói chung, việc giải (7.22) là rất phức tạp, vì T là hàm phức tạp của t_ℓ đối với bài toán một tạp tại nút l. Để khắc phục khó khăn này người ta thường phải chấp nhận thay cho (7.22), tìm Σ từ phương trình

$$\langle t_\ell \rangle = 0. \qquad (7.24)$$

Ở đây, t_ℓ là T-matrận của bài toán tán xạ đơn tạp ở nút 1 với nhiễu loạn $\mathcal{H}_1 - \Sigma$, nghĩa là:

$$t_\ell = (\varepsilon_\ell - \Sigma) / (1 - (\varepsilon_\ell - \Sigma) G_0(1, 1)) .$$

Chú ý là, ở khắp nơi trong tiết này, để tránh phức tạp không cần thiết, các năng lượng ε_ℓ đều được tính từ yếu tố chéo của Hamiltonian tuần hoàn $\mathcal{H}_0$.

Về bản chất, CPA kết hợp hai ý tưởng: một là thay hệ ngẫu nhiên bằng một hệ hiệu dụng sao cho trung bình hàm Green $\langle G \rangle$ của hệ ngẫu nhiên bằng hàm Green G_p của hệ hiệu dụng tuần hoàn; và hai là, hệ hiệu dụng được xác định bằng yêu cầu tự hợp, đòi hỏi thăng giáng của đại lượng vật lý đo trong hệ ngẫu nhiên xung quanh giá trị tương ứng của đại lượng đó trong hệ hiệu dụng phải bằng không ($\langle T \rangle = 0$). Yêu cầu này dẫn tới những hạn chế nhất định của CPA.

Nói chung CPA là gần đúng tốt cho một diện rộng các bài toán. Nó cho lại kết quả chính xác ở giới hạn mạng lý tưởng và là gần đúng tốt trong trường hợp mật độ tạp thấp hay độ rộng miền hẹp. Tuy nhiên, do yêu cầu về thăng giáng vừa nêu trên, trong khi CPA thường áp dụng tốt cho các bài toán ba chiều, nó lại là gần đúng không tốt cho các bài toán một chiều vì trong các hệ một chiều thăng giáng luôn là rất quan trọng. Cũng chính thăng giáng dẫn đến sự định xứ các trạng thái ở đuôi của vùng, ở biên của các cấu trúc đám... nên với các hệ loại như vậy, CPA cũng không phải là gần đúng đáng tin cậy.

7.3 Hàm Green và công thức độ dẫn điện Kubo

Khái niệm về độ dẫn điện đã được trình bày ở tiết 1.4, ở đó cũng đã thảo luận vì sao với các hệ không trật tự hình thức luận Boltzmann không còn sử dụng được và ta phải dùng công thức Kubo. Mục đích của tiết này là dẫn ra công thức Kubo một cách chi tiết và biểu diễn nó qua hàm Green.

Tenxơ độ dẫn điện được định nghĩa bằng hệ thức (1.43):

$$J_\alpha(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty dt' \int d\mathbf{r}' \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t') \, \mathcal{E}_\beta(\mathbf{r}', \mathbf{t}') . \qquad (7.25)$$

Vì trong các vật rắn độ dẫn thường chỉ phụ thuộc vào $(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, $\sigma_{\alpha\beta(\mathbf{r},\mathbf{r}')} = \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, nên bằng biến đổi Fourier, định nghĩa (7.25) cũng cho dạng phụ thuộc tần số và momentum của độ dẫn $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega)$. Tần số ω được xác định trong biểu thức của điện trường

$$\mathcal{E}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) = E_{\alpha} \exp\left(i\left(\mathbf{qr} - \omega t\right)\right). \tag{7.26}$$

Công thức độ dẫn điện Kubo đối với $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}.\omega)$ nhận được trong khuôn khổ lý thuyết phản ứng tuyến tính. Hamiltonian của hạt mang điện tích e trong điện trường (7.26) có thể viết dưới dạng $\mathcal{H} = H_0 + H_1$, trong đó $\mathcal{H}_1$ mô tả tương tác giữa hạt mang điện và điện trường:

$$\mathcal{H}_1 = -\int d\mathbf{r}\, j_{\alpha}(\mathbf{r}, t)\, A_{\alpha}(\mathbf{r}, t). \tag{7.27}$$

với $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ là thế vectơ của trường:

$$A_{\alpha}(\mathbf{r}, t) = -\frac{i}{\omega}\, \mathcal{E}_{\alpha}(\mathbf{r}, t). \tag{7.28}$$

Thay $\mathcal{E}_{\alpha}(\mathbf{r}, t)$ ở (7.26) vào (7.28), rồi thay $A_{\alpha}(\mathbf{r}, t)$ nhận được vào (7.27), lấy tích phân theo $\mathbf{r}$, ta được $\mathcal{H}_1$, biểu diễn qua biến đổi Fourier $j_{\alpha}(q)$ của toán tử mật độ dòng

$$\mathcal{H}_1 = \frac{i}{\omega}\, j_{\alpha}(\mathbf{q}.\ t)\, E_{\alpha} e^{-i\omega t}. \tag{7.29}$$

Khi viết (7.27) và (7.28) ta đã chọn điều kiện gauge dạng Coulomb (Coulomb gauge): $\nabla \mathbf{A} = 0$ và thế vô hướng bằng không, đồng thời bỏ qua các số hạng bậc cao của A (gần đúng tuyến tính). Ở đây, cần phân biệt hai ký hiệu: $J(\mathbf{r}, t)$ trong (7.25) là mật độ dòng điện gây bởi điện trường (đo trong các thí nghiệm), còn $\mathrm{j}(\mathbf{r})$ trong (7.27) là toán tử mật độ dòng có mặt trong Hamiltonian. Theo định nghĩa, mật độ dòng điện (đo được) chính là số đo giá trị vận tốc trung bình của hạt tải:

$$J_{\alpha}(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{\Omega}\left\langle \sum_i \mathrm{v}_{i\alpha}\, \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right\rangle \equiv \frac{e}{\Omega} \sum_i \langle \mathrm{v}_{i\alpha} \rangle \tag{7.30}$$

Trong trường ngoài với thế vectơ A:

$$\mathbf{v}_i = \frac{1}{m}\left(\mathbf{p}_i - e\mathbf{A}\left(\mathbf{r}_i\right)\right) .$$

Ở đây, cũng như trong (7.27) và (7.28), ta đặt vận tốc ánh sáng $c = 1$. Thay $\mathbf{v}_i$ nhận được vào (7.30), ta có

$$J_\alpha\left(\mathbf{r}, t\right) = \frac{e}{m\Omega}\sum_i \left\langle \mathrm{p}_{i\alpha}\right\rangle - \frac{e^2}{m\Omega}\sum_i A_\alpha\left(\mathbf{r}_i\right).$$

Thay p qua toán tử mật độ dòng $\mathrm{j} = e\mathbf{p}/m$ và A qua E theo hệ thức (7.28), kết quả cho

$$J_\alpha\left(\mathbf{r}, t\right) = \left\langle j_\alpha\left(\mathbf{r}, t\right)\right\rangle + i\,\frac{ne^2}{m\omega}\,\mathcal{E}_\alpha\left(\mathbf{r}, t\right). \tag{7.31}$$

Biểu thức nhận được gồm hai phần: phần đã rõ $J_\alpha^{(D)} = \left(ine^2/m\omega\right)\mathcal{E}_\alpha\left(\mathbf{r}, t\right)$ và phần còn phải tính $J_\alpha^{(P)} = \left\langle j_\alpha\left(\mathbf{r}, t\right)\right\rangle$.

Ta viết lại $J_\alpha^{(P)}$ trong biểu diễn Heisenberg (3.2):

$$J_\alpha^{(P)} = \langle\psi|\, e^{i(\mathcal{H}_0+\mathcal{H}_1)t}\, j_\alpha\left(\mathbf{r}\right)\, e^{-i(\mathcal{H}_0+\mathcal{H}_1)t}\,|\psi\rangle\,, \tag{7.32}$$

trong đó $|\psi\rangle$ là trạng thái cơ bản của $\mathcal{H}$. Sử dụng toán tử tiến hóa (3.9), ta viết lại (7.32) dưới dạng

$$J_\alpha^{(P)} = \langle\psi|\, U^+\left(t\right) e^{i\mathcal{H}_0 t}\, j_\alpha\left(\mathbf{r}\right)\, e^{-i\mathcal{H}_0 t} U\left(t\right)|\psi\rangle\ . \tag{7.33}$$

Chuyển sang biểu diễn tương tác, $j_\alpha\left(\mathbf{r}, t\right) = e^{i\mathcal{H}_0 t} j_\alpha\left(\mathbf{r}\right) e^{-i\mathcal{H}_0 t}$; $U\left(t\right)$ có dạng (3.14) và theo (3.19) $|\psi\rangle = S\left(0, -\infty\right)|\rangle$, trong đó $|\rangle$ là trạng thái cơ bản của $\mathcal{H}_0$. Kết hợp các điều này với chú ý đến biểu thức $S\left(t, t'\right)$ (3.18), ta thấy ngay rằng biểu thức (7.33) có thể viết lại thành

$$J_\alpha^{(P)}\left(\mathbf{r}, t\right) = \left\langle |\, S^+\left(t, -\infty\right) j_\alpha\left(\mathbf{r}, t\right) S\left(t, -\infty\right)|\right\rangle. \tag{7.34}$$

Tiếp theo, trong khuôn khổ lý thuyết phản ứng tuyến tính, ta không cần phải khai triển đầy đủ S-matrận, mà chỉ dừng lại ở số hạng bậc 1 theo $\mathcal{H}_1$:

$$\begin{aligned} S\left(t, -\infty\right)|\rangle &= \left[1 - i\int_{-\infty}^{t} dt'\mathcal{H}_1\left(t'\right)\right]|\rangle + O\left(\mathcal{H}_1\right)^2, \\ \langle|\, S^+\left(t, -\infty\right) &= \langle|\left[1 + i\int_{-\infty}^{t} dt'\mathcal{H}_1\left(t'\right)\right] + O\left(\mathcal{H}_1\right)^2. \end{aligned}$$

Thay hai biểu thức khai triển này vào (7.34) và cũng giữ lại chỉ đến số hạng tuyến tính theo $\mathcal{H}_1$, ta có:

$$J_\alpha^{(P)}(\mathbf{r}, t) = \langle| \{j_\alpha(\mathbf{r}, t) - i\int_{-\infty}^{t} dt' [j_\alpha(\mathbf{r}, t)\mathcal{H}_1(t') - \mathcal{H}_1(t')\, j_\alpha(\mathbf{r}, t)]\} |\rangle \, .$$

Vì khi không có điện trường ngoài thì dòng trung bình bằng không, nên số hạng ngoài tích phân $\langle| j_\alpha(r, t) |\rangle = 0$, và ta còn lại

$$J_\alpha^{(P)}(\mathbf{r}, t) = -i\int_{-\infty}^{t} dt' \langle| [j_\alpha(\mathbf{r}, t), \mathcal{H}_1(t')] |\rangle \, .$$

Với $\mathcal{H}_1$ lấy từ (7.29), giao hoán tử dưới dấu tích phân biến đổi thành

$$[j_\alpha(\mathbf{r}, t), \mathcal{H}_1(t')] = \frac{i}{\omega} E_\beta e^{-i\omega t'} [j_\alpha(\mathbf{r}, t), j_\beta(\mathbf{q}, t')]$$
$$= \frac{i}{\omega} \mathcal{E}_\beta(\mathbf{r}, t) . e^{-i\mathbf{qr}} . e^{i\omega(t-t')} [j_\alpha(\mathbf{r}, t), j_\beta(\mathbf{q}, t')] \, .$$

Và, do đó

$$J_\alpha^{(P)}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\omega} \mathcal{E}_\beta(\mathbf{r}, t)\, e^{-i\mathbf{qr}} \int_{-\infty}^{t} dt'\, e^{i\omega(t-t')} \langle| [j_\alpha(\mathbf{r}, t), j_\beta(\mathbf{q}, t')] |\rangle \, .$$

Đây chính là đại lượng $J_\alpha^{(P)} \equiv \langle j_\alpha(\mathbf{r}, t)\rangle$ mà ta cần tìm. Thay kết quả nhận được trở lại (7.31) và viết mật độ dòng tổng cộng dưới dạng

$$J_\alpha(\mathbf{r}, t) \equiv J_\alpha^{(P)} + J_\alpha^{(D)} = \Sigma_{\alpha\beta} \mathcal{E}_\beta(\mathbf{r}, t) \, ,$$

ta sẽ có

$$\Sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{\omega} e^{-i\mathbf{qr}} \int_{-\infty}^{t} dt'\, e^{i\omega(t-t')} \langle| [j_\alpha(\mathbf{r}, t), j_\beta(\mathbf{q}, t')] |\rangle + i\frac{ne^2}{m\omega}\delta_{\alpha\beta} \, .$$

Mặc dù đại lượng này đúng là hệ số trong phụ thuộc tuyến tính của mật độ dòng điện vào cường độ điện trường, nhưng nó chưa phải là độ dẫn điện. Để nhận được độ dẫn điện $\sigma_{\alpha\beta}$ ta phải lấy trung bình $\Sigma_{\alpha\beta}$ theo vị trí r,

$1/\Omega \int d\mathbf{r}\Sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$. Trong biểu thức của $\Sigma_{\alpha\beta}$ chỉ có hai thừa số phụ thuộc r, khi lấy tích phân chúng ghép lại thành:

$$\int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} j_\alpha(\mathbf{r}, t) = j_\alpha(-\mathbf{q}, t) \equiv j_\alpha^+(\mathbf{q}, t).$$

Bằng lấy trung bình như vậy, cuối cùng, ta nhận được công thức độ dẫn điện Kubo:

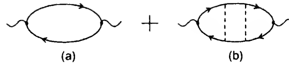
$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\omega\Omega}\int_{-\infty}^{t} dt' e^{i\omega(t-t')} \langle | \left[j_\alpha^+(\mathbf{q}, t), j_\beta(\mathbf{q}, t') \right] | \rangle + i\frac{ne^2}{m\omega}\delta_{\alpha\beta}. \quad (7.35)$$

Công thức này nhận được trong khuôn khổ lý thuyết phản ứng tuyến tính, mà cơ sở của nó là định lý tiêu tán - thăng giáng (fluctuation-dissipation theorem). Hạt nhân của công thức Kubo là một hàm kết hợp mật độ dòng - mật độ dòng. Định lý tiêu tán thăng giáng cho hệ thức giữa tiêu tán năng lượng của hạt khi có trường ngoài và thăng giáng của mật độ dòng. Trong khi tiêu tán năng lượng cho phép xác định mật độ dòng điện, thăng giáng mô tả bằng hàm kết hợp. Kết quả là, độ dẫn điện được biểu diễn qua hàm kết hợp mật độ dòng - mật độ dòng như trong (7.35).

Bởi vì hàm kết hợp nằm dưới dấu tích phân trong (7.35) phụ thuộc chỉ vào $(t - t')$, bằng dịch biến thời gian $(t - t') \to t$, công thức Kubo (7.35) có thể viết lại dưới dạng

$$\sigma_{\alpha\beta}(q, \omega) = \frac{1}{\omega\Omega}\int_{0}^{\infty} dt\, e^{i\omega t} \langle | \left[j_\alpha^+(q, t), j_\beta(q, 0) \right] | \rangle + i\frac{ne^2}{m\omega}\delta_{\alpha\beta}. \quad (7.36)$$

Công thức Kubo (7.35) hay (7.36) cho độ dẫn điện ở nhiệt độ không, trong đó $|\rangle$ là trạng thái cơ bản của Hamiltonian $\mathcal{H}$ (bao gồm tất cả các tương tác có thể, trừ $\mathcal{H}_1$ liên quan với điện trường). Trong khi số hạng thứ hai ở vế phải của các công thức này tương ứng với phản ứng trực tiếp của hệ đối với thế vectơ của trường (dòng dịch chuyển), thì số hạng đầu là phản ứng do tương quan dòng-dòng. Biểu thức tương quan dòng-dòng tương ứng với một hàm Green trễ hai hạt, một hàm truyền electron - lỗ trống, có thể mô tả bằng các giản đồ trên hình 7.1.



Hình 7.1: Các giản đồ đóng góp vào độ dẫn điện Kubo khi có tán xạ tạp chất.

Giản đồ (a) mô tả quá trình, trong đó một cặp electron - lỗ trống được sinh ra tại một thời điểm nào đó, truyền đi một cách độc lập với nhau, và tái hợp lại ở một thời điểm khác. Trong quá trình truyền đi, mỗi hạt có thể độc lập tán xạ lên các tâm tạp. Và, như vậy, mỗi đường trên giản đồ này tương ứng với một hàm Green một hạt tán xạ tạp chất. Giản đồ (b) mô tả quá trình khi có tương quan giữa electron và lỗ trống trong quá trình tán xạ với tạp.

7.4 Tính độ dẫn điện Kubo

Trong tiết này ta sẽ lần lượt tính đóng góp của các giản đồ trên hình 7.1 vào độ dẫn điện cho trường hợp hạt tán xạ với các tạp chất phân bố hoàn toàn ngẫu nhiên.

7.4.1 Tán xạ tạp chất

Tán xạ của electron lên tâm tạp cho đóng góp vào độ dẫn điện. Mỗi tâm tạp tạo một thế Coulomb tác dụng tầm xa. Trong các hệ thực, do hiệu ứng chắn, bán kính tác dụng của các thế này bị cắt ngắn lại, bảo đảm sự hội tụ cho các tích phân của thế tạp:

$$\begin{aligned} V_I &= \int d\mathbf{r} \sum_j V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)\, n(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{q,j} V(-\mathbf{q})\, e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \sum \psi_{k'}^{+} \psi_k \delta_{k',k-q} \delta_{ss'} \,. \end{aligned} \tag{7.37}$$

Ở đây $\mathbf{R}_j$ là vị trí tâm tạp, hàm delta $\delta_{ss'}$ liên quan với bảo toàn spin của hạt. Do tán xạ, electron (hay lỗ trống) chuyển từ một trạng thái sóng phẳng

này sang một trạng thái sóng phẳng khác. Ta bỏ qua sự thay đổi có thể của trạng thái lõi tạp và do đó ảnh hưởng ngược lại có thể của sự thay đổi này lên quá trình tán xạ.

Khi tính hàm Green của hạt với thế tương tác (7.37), ta phải khai triển S-matrận (4.49):

$$S(t, t') = T \exp\left(-i \int_{-t'}^{t} dt_1 V_I(t_1)\right) .$$

Với dạng thế V_I (7.37), ở số mũ của các số hạng trong khai triển S-matrận, nói chung, có một đại lượng trung bình dạng:

$$f_n(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \ldots, \mathbf{q}_n) = \left\langle \sum \exp(i\mathbf{q}_1\mathbf{R}_1 + i\mathbf{q}_2\mathbf{R}_2 + \ldots + i\mathbf{q}_n\mathbf{R}_n) \right\rangle ,$$

ở đây trung bình lấy theo các cấu hình vị trí không gian có thể của tạp. Ta thường giả thiết rằng, tạp phân bố hoàn toàn ngẫu nhiên trong không gian. Khi đó, trung bình theo cấu hình tạp có thể thực hiện bằng phương pháp do Kohn và Luttinger đề xuất (Kohn and Luttinger 1957). Để hiểu phương pháp này, ta bắt đầu từ trường hợp $n = 1$:

$$f_1(\mathbf{q}) = \left\langle \sum_{j}^{N_I} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \right\rangle = N_I \delta_{\mathbf{q}} . \tag{7.38}$$

Kết quả này là rõ ràng vì với $\mathbf{R}_j$ hoàn toàn ngẫu nhiên, $f_1(\mathbf{q})$ chỉ khác không và bằng số tâm tạp N_I nếu $\mathbf{q} = 0$. Xét trường hợp $n = 2$, ta có:

$$\begin{aligned} f_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) &= \left\langle \sum_{\ell,m} \exp(i\mathbf{q}_1\mathbf{R}_\ell + i\mathbf{q}_2\mathbf{R}_m) \right\rangle \\ &= \left\langle \sum_{l=m} \exp(i(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2)\mathbf{R}_\ell) + \sum_{l \neq m} \exp(i\mathbf{q}_1\mathbf{R}_\ell + i\mathbf{q}_2\mathbf{R}_m) \right\rangle . \end{aligned}$$

Số hạng thứ nhất chính là $f_1(\mathbf{q})$ với $\mathbf{q} = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2$, còn số hạng thứ hai chỉ khác không khi $\mathbf{q}_1 = 0$ và $\mathbf{q}_2 = 0$, và khi đó số hạng này bằng số số hạng có trong tổng $N_I(N_I - 1)$. Kết quả là:

$$f_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = N_I \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2} + N_I(N_I - 1)\delta_{\mathbf{q}_1}\delta_{\mathbf{q}_2} . \tag{7.39}$$

Các kết quả (7.38) và (7.39) có thể mở rộng cho trường hợp n bất kỳ:

$$f_n(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \ldots, \mathbf{q}_n) = N_I \delta(\Sigma \mathbf{q}_i) +$$

$$N_I(N_I - 1) \sum_m \delta\left(\sum_1^m \mathbf{q}_i\right) \delta\left(\sum_{m+1}^{N_I} \mathbf{q}_i\right) + N_I(N_I - 1)$$

$$(N_I - 2)\,\delta(\Sigma \mathbf{q})\,\delta(\Sigma \mathbf{q})\,\delta(\Sigma \mathbf{q}) + \ldots \quad (7.40)$$

Ở các số hạng có tích của một số hàm $\delta\left(\sum \mathbf{q}\right)$, ta phải lấy tất cả các tổ hợp có thể của phân bố $\mathbf{q}_i$ trong các hàm delta. Ví dụ, với $n = 3$, (7.40) cho:

$$f_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) = N_I \delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3} + N_I(N_I - 1)\left[\delta_{\mathbf{q}_1}\delta_{\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3}\right.$$
$$\left. + \delta_{\mathbf{q}_2}\delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3} + \delta_{\mathbf{q}_3}\delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2}\right] + N_I(N_I - 1)(N_I - 2)\,\delta_{\mathbf{q}_1}\delta_{\mathbf{q}_2}\delta_{\mathbf{q}_3}.$$

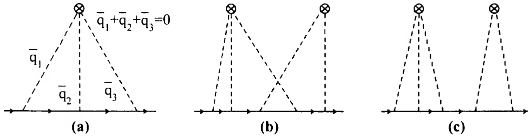
Trong các hệ thực vì N_I thường rất lớn, $N_I > 10^{10}$, công thức (7.40) có thể gần đúng viết dưới dạng

$$\begin{aligned} f_n(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \ldots, \mathbf{q}_n) &= N_I \delta(\Sigma \mathbf{q}) + N_I^2 \delta(\Sigma \mathbf{q})\,\delta(\Sigma \mathbf{q}) \\ &+ N_I^3 \delta(\Sigma \mathbf{q})\,\delta(\Sigma \mathbf{q})\,\delta(\Sigma \mathbf{q}) + \ldots \end{aligned} \quad (7.41)$$

Mỗi số hạng trong tổng trên đều có dạng tích của các nhân tử $N_I \delta(\Sigma \mathbf{q})$.. Nhân tử này có thể giải thích như tán xạ của hạt với một tạp đơn lẻ. Nhân tử $\delta(\Sigma \mathbf{q})$ ngụ ý là momentum của hạt bảo toàn trong khi tán xạ. Tán xạ với một tâm tạp có thể mô tả chẳng hạn bằng hình 7.2a, ở đó ký hiệu ⊗ mô tả tạp; đường liền nét mô tả hạt, còn đường đứt nét mô tả tương tác $V(\mathbf{q}_i)$. Bảo toàn momentum đòi hỏi $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3 = 0$. Số hạng thứ hai trong (7.41) mô tả bằng các giản đồ trên hình 7.2b và 7.2c. Trong giản đồ trên hình 7.2 (b) có hai đường tương tác cắt nhau. Giản đồ này cho đóng góp quan trọng khi mật độ tạp lớn. Trên hình 7.2c hai tán xạ độc lập với nhau.

Bây giờ ta có thể viết biểu thức của hàm Green tán xạ tạp, chẳng hạn $G^R(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. Trước hết, từ yêu cầu bảo toàn momentum trong tán xạ tạp vừa thảo luận ở trên, ta có ngay:

$$G^R(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} G^R(\mathbf{k}). \quad (7.42)$$



Hình 7.2:

Ta biểu diễn tiếp $G^R(\mathbf{k})$ theo phương trình Dyson (4.71):

$$G^R(\mathbf{k})^{-1} = G_0^R(\mathbf{k})^{-1} - \Sigma^R(\mathbf{k}) \,, \tag{7.43}$$

trong đó năng lượng riêng Σ^R là tổng đóng góp của tất cả các giản đồ năng lượng riêng tối giản; $G_0^R(\mathbf{k})$ là hàm Green không tán xạ (3.33):

$$G_0^R(\mathbf{k}) = (E - E(k) + i\eta_\varphi)^{-1} \,. \tag{7.44}$$

Ta có thể viết

$$\Sigma^R(\mathbf{k}) = \sigma_{e\ell}(\mathbf{k}) - i\eta_{e\ell} \tag{7.45}$$

(chỉ số "$e\ell$" ngụ ý là do các tán xạ đàn hồi, elastic). Thay (7.44) và (7.45) vào (7.43) và (7.42), ta được

$$G^R(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\left[E - (E(k) + \sigma_{e\ell}) + i(\eta_\varphi + \eta_{e\ell})\right]^{-1} \,. \tag{7.46}$$

Ý nghĩa của từng số hạng trong năng lượng riêng (7.45) sẽ trở nên rõ ràng, nếu ta chuyển (7.46) sang dạng phụ thuộc thời gian

$$G^R(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \Rightarrow \exp\left[\frac{i(E(k) + \sigma_{e\ell})t}{\hbar}\right] \exp\left[-\frac{(\eta_\varphi + \eta_{e\ell})t}{\hbar}\right] .$$

Ta thấy, phần thực $\sigma_{e\ell}$ của Σ^R (7.45) bổ sung vào năng lượng của hạt, còn phần ảo $\eta_{e\ell}$ tham gia vào làm giảm biên độ của hàm Green:

$$|G^R(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \Rightarrow \exp\left[-2(\eta_\varphi + \eta_{e\ell})t/\hbar\right] .$$

Thời gian đặc trưng cho sự giảm này τ ("thời gian sống" của trạng thái) được xác định bằng

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2}{\hbar}(\eta_\varphi + \eta_{e\ell}) \equiv \frac{1}{\tau_\varphi} + \frac{1}{\tau_{e\ell}} \,, \tag{7.47}$$

trong đó $\tau_\varphi = \hbar/2\eta_\varphi$ và $\tau_{e\ell} = \hbar/2\eta_{e\ell}$, tương ứng, là thời gian sống không đàn hồi (thời gian hồi chuyển pha - phase relaxation time (Datta 1992)) và thời gian sống đàn hồi. Để quan sát được hiện tượng định xứ phải có $\tau_{e\ell} \ll \tau_\varphi$, khi đó $\tau \approx \tau_{e\ell}$.

Nếu ta giả thiết tán xạ là yếu (như thường xảy ra trong thực tế) thì có thể bỏ qua $\sigma_{e\ell}$ bên cạnh $E(k) = \hbar^2k^2/2m$ trong (7.46), rồi sử dụng (7.47), viết lại hàm Green tán xạ tạp dưới dạng (dấu $+(-)$ tương ứng với $G^R\left(G^A\right)$):

$$G^{R(A)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\left(E - E(\mathbf{k}) \pm \imath\hbar/2\tau\right)^{-1} . \tag{7.48}$$

7.4.2 Công thức Drude

Trong phần còn lại của tiết này ta sẽ chỉ thảo luận độ dẫn dòng không đổi (d.c. conductivity) và thực hiện tính toán cụ thể cho các hệ hai chiều. Độc giả nào quan tâm đến độ dẫn phụ thuộc tần số, cũng như các hệ một chiều, ba chiều có thể tham khảo các bài tổng quan rất bổ ích: Altshuler and Aronov 1985, Bergmann 1984, và Lee and Ramakrishnan 1985.

Với trường hợp dòng không đổi công thức Kubo có thể viết dưới dạng (Datta 1992, Ferry and Goodnick 1997):

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{e^2\hbar^3}{\pi m^2}\sum_{k,k'} k_\alpha k'_\beta \left\langle |G^R(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2\right\rangle \delta(E_k - E_f), \tag{7.49}$$

trong đó hàm $\delta(E_k - E_f)$ ngụ ý rằng chỉ những hạt ở bề mặt Fermi mới có thể tham gia vào quá trình dẫn ở $T = 0$. Ở đây, ta còn dùng ký hiệu $\langle \ldots \rangle$ để chỉ rõ là đại lượng $|G^R(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \equiv G^R(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\, G^A(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ cần được trung bình theo cấu hình vị trí tạp.

Trước hết, xét giản đồ trên hình 7.1a. Hai đường electron và lỗ trống tách biệt nhau, không có tương quan nào. Hệ quả là $\left\langle G^R G^A\right\rangle = \left\langle G^R\right\rangle\left\langle G^A\right\rangle$, trong đó $\left\langle G^{R(A)}\right\rangle$ chính là các hàm Green tán xạ tạp (7.48). Thay (7.48) vào (7.49), ta được

$$\sigma_0 \equiv \sigma_{xx} = \frac{e^2\hbar^3}{\pi m^2}\sum_k (k_x)^2 \left.\frac{1}{(E - E(k))^2 + \eta^2}\right|_{E(k)=E_f}$$

$$= \frac{e^2\hbar^3}{\pi m^2}\int \frac{kdk}{4\pi^2}\,k^2\cos^2\theta d\theta\,\frac{1}{(E-E(k))^2+\eta^2}\Bigg|_{E(k)=E_f}.$$

Chuyển $k^3dk = (1/2)(2m/\hbar^2)EdE$ rồi sử dụng gần đúng

$$\frac{\eta}{(E-E(k))^2+\eta^2} \approx \pi\delta(E-E(k)),$$

ta được

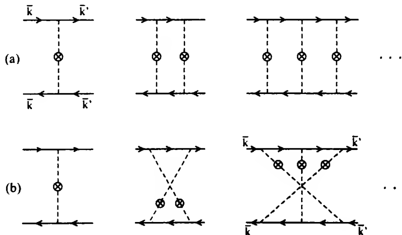
$$\sigma_0 = \frac{e^2\hbar^3}{\pi m^2}\cdot\frac{1}{4\pi^2}\pi\frac{1}{\eta}\pi\frac{1}{2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 E(k)\Bigg|_{E(k)=E_f}.$$

Thay $E(k) = E_f = n/(m/\pi\hbar^2)$, trong đó n là mật độ electron và $m/\pi\hbar^2$ là mật độ trạng thái trong hệ hai chiều, ta nhận được chính xác công thức Drude (1.53)

$$\sigma = e^2 n\tau/m$$

với $\tau = \hbar/2\eta$.

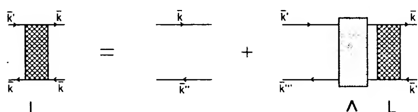
Để nhận được kết quả trên ta đã sử dụng hai giả thiết quan trọng: một là, tán xạ yếu (để có thể bỏ qua σ_{el} bên cạnh $E(k)$ trong (7.46)) và hai là, bỏ qua tương quan giữa hai đường electron và lỗ trống (để có thể tính đến chỉ giản đồ trên hình 7.1a).



Hình 7.3: (a) Các giản đồ thang; (b) Các giản đồ cắt chéo cực đại

Tính đến tương quan giữa hai đường electron và lỗ trống, ta phải xem xét các giản đồ trên hình 7.1b. Các giản đồ này bao gồm hai nhóm, gọi là

các giản đồ thang (ladder diagrams) và giản đồ cắt chéo cực đại (maximally crossed diagrams), như mô tả trên hình 7.3. Việc tính các giản đồ hai hạt tương tác như thế này có thể thực hiện dựa trên phương trình Bethe-Salpeter (xem, chẳng hạn, Ferry and Goodnick 1997 hay Janssen 2001).



Hình 7.4: Biểu diễn giản đồ của phương trình Bethe-Salpeter

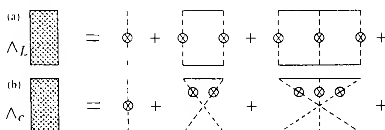
Nói chung, nội dung cơ bản của vật lý các hiện tượng truyền dẫn (transport) cũng như các thăng giáng nhiệt động, quy về tính các hàm tương quan. Hàm tương quan hai hạt $L(\mathbf{k},\mathbf{k}';\mathbf{k}'',\mathbf{k}''')$ bất kỳ có thể tính bằng kỹ thuật giản đồ dựa trên phương trình Bethe Salpeter, minh họa trên hình 7.4, trong đó đại lượng $\wedge$ thường được gọi là vertex tán xạ tối giản (irreducible scattering vertex).

Đóng góp chính vào $\wedge$ là từ tương tác bậc hai nối hai hàm Green. Với hai loại tương quan mô tả bằng các giản đồ trên hình 7.3, ta có các vertex tối giản như mô tả trên hình 7.5. Phương trình Bethe-Salpeter có dạng:

$$L(\mathbf{k},\mathbf{k}';\mathbf{k}',\mathbf{k}) = G^R(\mathbf{k})\,G^A(\mathbf{k})\,(1+\wedge(\mathbf{k},\mathbf{k}';\mathbf{k}',\mathbf{k})\,.\,L(\mathbf{k},\mathbf{k}';\mathbf{k}',\mathbf{k})) \quad (7.50)$$

Số hạng đầu tiên không phải gì khác, mà chính là đóng góp mô tả bởi giản đồ trên hình 7.1a, dẫn tới công thức Drude mà ta vừa xem xét. Để tính các đóng góp còn lại, ta phải tính $\wedge$.

Việc tính $\wedge_L$ cho các giản đồ thang không có gì đặc biệt và chỉ dẫn đến một bổ chính phụ thuộc vào góc tán xạ mà kết quả cuối cùng là thời gian τ trong công thức Drude (1.53) được thay thế bằng thời gian hồi chuyển momentum τ_m (Ferry and Goodnick 1997). Ta sẽ tập trung thảo luận các giản đồ cắt chéo cực đại, chúng mô tả bổ chính lượng tử vào độ dẫn điện.



Hình 7.5: Vertex tối-giản: (a) Λ_L với giản đồ thang, (b) Λ_c với giản đồ cắt-chéo cực-đại.

7.4.3 Bổ chính lượng tử

Trước hết ta thảo luận ý nghĩa vật lý của các giản đồ cắt chéo cực đại. Ở nhiệt độ thấp, với electron dẫn có hai thời gian đặc trưng: thời gian đàn hồi τ_e là thời gian sống đối với trạng thái riêng momentum và thời gian không đàn hồi τ_φ là thời gian sống của trạng thái riêng năng lượng. Ở nhiệt độ Hêli lỏng, τ_φ thường lớn gấp vài bậc giá trị so với τ_e. Do đó electron dẫn có thể tán xạ lên nhiều tạp mà vẫn "ghi nhớ" pha của mình. Nói cách khác, sự kết hợp pha của electron vẫn được duy trì ngay cả khi chúng đã tán xạ lên nhiều tạp.

Không tính đến hiệu ứng kết hợp pha, tán xạ tạp chỉ đơn giản dẫn đến mất trật tự (disorder). Nếu mất trật tự là yếu, ta có thể sử dụng lý thuyết Boltzmann. Nếu mất trật tự là mạnh, thì trạng thái electron trở thành định xứ. Hiệu ứng kết hợp pha dẫn đến bổ chính quan trọng vào độ dẫn. Đó là bổ chính liên quan đến các tán xạ trở lại (backscatterings), được Langer và Neal mô tả bằng các giản đồ cắt chéo cực đại (Langer and Neal 1966).

Giả sử tại thời điểm $t = 0$, một electron có momentum $\mathbf{k}$ và hàm sóng $\propto \exp(i\,\mathbf{kr})$. Sau thời gian τ, nó tán xạ đến trạng thái với momentum $\mathbf{k}'_1$, rồi sau thời gian 2τ đến $\mathbf{k}'_2 \dots$ Tất nhiên, tồn tại một xác suất hữu hạn để sau một số bước nào đó electron này tán xạ đến trạng thái với momentum $-\mathbf{k}$:

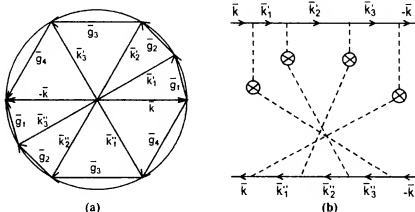
$$\mathbf{k} \xrightarrow[\mathbf{g}_1]{} \mathbf{k}'_1 \xrightarrow[\mathbf{g}_2]{} \mathbf{k}'_2 \longrightarrow \dots \longrightarrow \mathbf{k}'_{n-1} \xrightarrow[\mathbf{g}_n]{} \mathbf{k}_n = -\,\mathbf{k},$$

với các momentum trao đổi tương ứng là $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots \mathbf{g}_n$. Và, cũng tất nhiên là, tồn tại một xác suất ngang bằng để cho electron tán xạ từ trạng thái $\mathbf{k}$

đến − k bằng con đường:

$$\mathbf{k} \xrightarrow[\mathbf{g}_n]{} \mathbf{k}_1'' \xrightarrow[\mathbf{g}_{n-1}]{} \mathbf{k}_2'' \longrightarrow \ldots \longrightarrow \mathbf{k}_{n-1}'' \xrightarrow[\mathbf{g}_1]{} \mathbf{k}_n'' = -\mathbf{k}$$

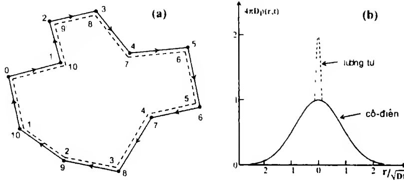
với chính xác cùng các momentum trao đổi như trên nhưng theo trật tự ngược lại: $\mathbf{g}_n, \mathbf{g}_{n-1} \ldots \mathbf{g}_1$ hình 7.6a. Các quá trình này có thể mô tả bằng giản đồ momentum như trên hình 7.6b. Rõ ràng, đây chính là giản đồ cắt chéo cực đại.



Hình 7.6: (a) Minh họa cho ý nghĩa vật lý của giản đồ Langer Neal; (b) Giản đồ Langer Neal (giản đồ cắt chéo cực đại)

Quan trọng là hai đường truyền là hoàn toàn đối xứng, xác suất chuyển tương ứng với từng bước là như nhau, năng lượng ở các trạng thái trung gian tương ứng là như nhau, và do đó thay đổi pha theo thời gian ($\sim Et/\hbar$) là như nhau và các biên độ ở các trạng thái cuối ($-\mathbf{k}$) cũng là như nhau, $A' = A'' = A$. Do kết hợp về pha, hai sóng giao thoa với nhau và biên độ tổng cộng ở trạng thái cuối là $|A' + A''|^2 = |A'|^2 + |A''|^2 + A'^* A'' + A' A''^* = 4|A|^2$. Nếu hai sóng là không kết hợp pha, thì biên độ tổng cộng chỉ là $2|A|^2$. Như vậy, trên phương tán xạ trở lại cường độ tán xạ mạnh lên gấp hai lần. Điều này hẳn là sẽ dẫn đến một bổ chính vào độ dẫn. Về bản chất, bổ chính này liên quan với các số hạng giao thoa $A'^* A'' + A' A''^*$, và giản đồ cắt chéo cực đại trên hình 7.6b mô tả đóng góp của chính các số hạng này.

Trong không gian thực, quá trình tán xạ trở lại có thể mô tả bằng hình 7.7a với hai con đường khuyếch tán đồng khả năng: $0 \to 1 \to 2 \to \ldots \to 10 \to 0$ và $0 \to 1' \to 2' \to \ldots \to 10' \to 0$.



Hình 7.7: (a) Đường khuyếch tán của electron dẫn;
(b) Phân bố xác suất của electron khuyếch tán, bắt đầu ở $r = 0$, $t = 0$

Từ phương trình khuyếch tán cổ điển (bài tập B2.3) ta biết, xác suất tìm hạt tại r ở thời điểm t là

$$p(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi Dt} \exp\left(-r^2/4Dt\right)$$

(hạt bắt đầu ở $\mathbf{r} = 0$ và $t = 0$). Nếu tại t hạt khuyếch tán trở lại vị trí ban đầu, $\mathbf{r} = 0$, thì $p(0, t) = 1/4\pi Dt$. Nếu hạt khuyếch tán theo hai con đường với cùng xác suất (hình 7.7a), thì do bản chất sóng của electron, khi gặp nhau các biên độ sóng riêng phần (chứ không phải cường độ) cộng lại, và kết quả là xác suất tìm hạt ở $(t, \mathbf{r} = 0)$ trong bài toán khuyếch tán lượng tử lớn gấp hai lần trong bài toán cổ điển tương ứng (hình 7.7b). Ta có cùng một bức tranh vật lý như vừa thảo luận ở trên trong không gian momentum.

Như vậy, về mặt vật lý, các giản đồ cắt chéo cực đại mô tả hiệu ứng giao thoa giữa hai sóng ngược chiều thời gian, tán xạ dọc theo cùng một vòng kín. Theo (7.50) phần bổ chính vào độ dẫn điện do các giản đồ này là

$$\begin{aligned}\delta\sigma_{xx} \;=\; & \frac{e^2\hbar^3}{\pi m^2} \sum k_x k'_x G^R(\mathbf{k}, E)\, G^A(\mathbf{k}, E) \wedge (\mathbf{k}, \mathbf{k}') \,. \\ & G^R(\mathbf{k}', E)\, G^A(\mathbf{k}', E)\,. \qquad (7.51)\end{aligned}$$

Để tính bổ chính này ta chú ý là, như sẽ thấy dưới đây, đại lượng $\wedge(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ chỉ phụ thuộc vào $\mathbf{k} + \mathbf{k}' = \mathbf{q}$, do đó bằng cách đặt $\mathbf{k}' = -\mathbf{k} + \mathbf{q}$, ta có thể chuyển $\int d\mathbf{k} \int d\mathbf{k}' \to \int d\mathbf{k} \int d\mathbf{q}$, trong đó tích phân theo $\mathbf{q}$ sẽ chỉ tác dụng lên $\wedge(\mathbf{q})$, còn tích phân theo $\mathbf{k}$ có thể thay bằng tích phân theo $E(k)$ (xem

B7.3). Ngoài ra, khi thay $\mathbf{k}' = -\mathbf{k} + \mathbf{q}$, ở dưới mẫu số của hàm Green tán xạ (7.48) ta sẽ gặp $E(k') = \hbar^2 k'^2/2m = \hbar^2(-\mathbf{k}+\mathbf{q})^2/2m$. Với giả thiết tán xạ yếu ($|q|$ nhỏ) và nhiệt độ thấp, ta có thể gần đúng

$$E(k') = \hbar^2 k'^2/2m \approx E(k) - \hbar \mathbf{v}_f(\mathbf{k})\,\mathbf{q}\,. \tag{7.52}$$

Ở số hạng thứ hai ta đã thay $k \to k_f = mv_f/\hbar$.

Với những chú ý trên, ta chuyển các tổng trong (7.51) thành hai tích phân, theo $\mathbf{q}$ (chỉ tác dụng lên $\wedge(\mathbf{q})$) và theo $\mathbf{k}$ (chỉ tác dụng lên các hàm Green). Hai tích phân này có thể tính riêng biệt. Thay các hàm Green bằng (7.48) với gần đúng (7.52), nhân tử tích phân theo $\mathbf{k}$ có dạng:

$$\begin{aligned} I &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}\, k_x^2 \left(E - E(k) + i\hbar/2\tau\right)^{-1} \left(E - E(k) - i\hbar/2\tau\right)^{-1}. \\ &\quad \left(E - E(k) + \hbar\mathbf{v}_f\mathbf{q} + i\hbar/2\tau\right)^{-1} \left(E - E(k) + \hbar\mathbf{v}_f\mathbf{q} - i\hbar/2\tau\right)^{-1} \\ &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}\, k_x^2 \mathcal{F}(E(k)) = k_f^2 N(E_f) \int dE_k \mathcal{F}(E_k)\,. \end{aligned}$$

Khi viết dấu bằng cuối cùng ở trên, ta đã sử dụng (B7.3). Tích phân còn lại có thể lấy trên nửa mặt phẳng trên. Sử dụng định lý thặng dư với hai cực của hàm $\mathcal{F}(E_k)$ là $E_1 = E + i\hbar/2\tau$ và $E_2 = E + \hbar\mathbf{v}_f\mathbf{q} + i\hbar/2\tau$, ta dễ dàng nhận được:

$$I = k_f^2 N(E_f)\,.2\pi i \frac{1}{(i\hbar/\tau)\left[(\hbar\mathbf{v}_f\mathbf{q})^2 + (\hbar/\tau)^2\right]}\,.$$

Với tán xạ yếu, bỏ qua số hạng với q^2 ở mẫu số, ta có:

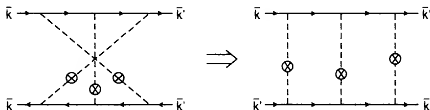
$$I = 4\pi k_f^2 N(E_f)\,\tau^3/\hbar^3\,. \tag{7.53}$$

Quả là đại lượng này không phụ thuộc vào q. Với nhân tử tích phân theo $\mathbf{k}$ vừa nhận được, $I = (7.53)$, bổ chính (7.51) chuyển thành

$$\delta\sigma_{xx} = -\frac{2\pi N(E_f)\,\tau}{\hbar}\frac{e^2}{\pi\hbar} D\tau \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \wedge(\mathbf{q})\,, \tag{7.54}$$

ở đây, ta đã đưa vào hằng số khuyếch tán $D = v_f^2\tau/2 \equiv \left(\hbar^2 k_f^2/m^2\right)\tau/2$. Việc còn lại là tính $\wedge(\mathbf{q})$.

Để ý là, nếu ta quay, đổi chiều thời gian của một trong hai đường (chẳng hạn đường dưới, đường lỗ trống) thì như thấy ở ví dụ trên hình 7.8, các giản đồ cắt chéo cực đại trở nên có dạng giống như giản đồ thang. Tuy nhiên, giữa hai giản đồ có điểm khác nhau cơ bản: giản đồ thang trên hình 7.3a mô tả cặp electron - lỗ trống, còn giản đồ trên hình 7.8 mô tả sự truyền của một cặp electron-electron (tương tự cặp Cooper).



Hình 7.8:

Với phép quay như vậy, vertex tối giản $\Lambda = \Lambda_c$ trên hình 7.5 (b) trở nên có dạng như trên hình 7.9. Khi viết biểu thức giải tích tương ứng với các giản đồ trên hình này ta chú ý là, mỗi đường truyền cho một tích các hàm Green và các yếu tố matrận tán xạ. Ví dụ, biểu thức tương ứng với giản đồ thứ ba là:

$$\sum_{g_1}\sum_{g_2} V_{g_1} G^R(\mathbf{k}+\mathbf{g}_1, E)\, V_{g_2} G^R(\mathbf{k}+\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2, E)\, V_{g_3}$$
$$V^*_{g_1} G^A(\mathbf{k}'-\mathbf{g}_1, E')\, V^*_{g_2} G^A(\mathbf{k}'-\mathbf{g}_1-\mathbf{g}_2, E')\, V^*_{g_3}.$$

Ở đây, giả thiết tán xạ là đẳng hướng,

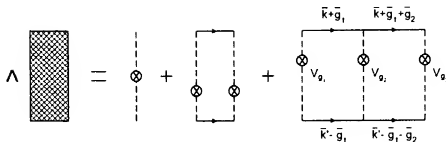
$$|V_{g_1}|^2 = |V_{g_2}|^2 = \ldots = \frac{\hbar}{2\pi N(E_f)\,\tau} \equiv \Gamma_0. \qquad (7.55)$$

Từ hình 7.9, rõ ràng là đại lượng Λ có thể tính bằng:

$$\Lambda = \Gamma_0 + \Gamma_0\Pi\Gamma_0 + \Gamma_0\Pi\Gamma_0\Pi\Gamma_0 + \ldots = \frac{\Gamma_0}{1-\Pi\Gamma_0}, \qquad (7.56)$$

trong đó Γ_0 xác định bằng biểu thức (7.55), còn

$$\Pi = \sum_g G^R(\mathbf{k}+\mathbf{g}; E)\, G^A(\mathbf{k}'-\mathbf{g}; E)\ . \qquad (7.57)$$



Hình 7.9:

Đại lượng Π này có thể tính bằng cách đặt $\mathbf{k}'' = \mathbf{k} + \mathbf{g}$ và $\mathbf{k} + \mathbf{k}' = \mathbf{q}$. Khi đó, $\mathbf{k}' - \mathbf{g} = -\mathbf{k}'' + \mathbf{q}$ và (7.57) có thể viết lại thành

$$\begin{aligned}
\Pi(\mathbf{q}) &= \int \frac{d\mathbf{k}''}{(2\pi)^2} G^R(\mathbf{k}'', E)\, G^A(-\mathbf{k}'' + \mathbf{q}, E') \\
&= N(E_f) \int \frac{d\Omega_{k''}}{2\pi} \int dE_{k''} \frac{1}{E - E(k'') + i\hbar/2\tau + i\hbar/2\tau_\varphi} \\
&\quad \frac{1}{E - E(k'') + \hbar \mathbf{v}_f \mathbf{q} - i\hbar/2\tau - i\hbar/2\tau_\varphi}. \qquad (7.58)
\end{aligned}$$

Ở đây, ta đã sử dụng (7.48), gần đúng (7.52), đồng thời phụ thêm vào năng lượng riêng của các hàm Green số hạng $i\hbar/2\tau_\varphi$, trong đó τ_φ là thời gian hồi chuyển pha (phase relaxation time).

Tích phân theo năng lượng trong biểu thức trên có thể lấy trên nửa mặt phẳng dưới, ở đó hàm dưới dấu tích phân có một cực:

$$E(k'') = E + \hbar \mathbf{v}_f \mathbf{q} - i\hbar/2\tau - i\hbar/2\tau_\varphi \,.$$

Kết quả cho:

$$\begin{aligned}
\Pi(\mathbf{q}) &= N(E_f).2\pi i \int \frac{d\Omega_{k''}}{2\pi} \frac{1}{\hbar \mathbf{v}_f \mathbf{q} - i\hbar/\tau - i\hbar/\tau_\varphi} \\
&= N(E_f)\, 2\pi \frac{\tau}{\hbar} \int \frac{d\Omega_{k''}}{2\pi} \frac{1}{1 + \tau/\tau_\varphi + i\tau \mathbf{v}_f \mathbf{q}} \\
&= \frac{2\pi N(E_f)\tau}{\hbar} \int \frac{d\Omega_{k''}}{2\pi} \Big(1 - \tau/\tau_\varphi - i\tau \mathbf{v}_f \mathbf{q} + \\
&\qquad + \frac{1}{2}(i \mathbf{v}_f \mathbf{q} \tau)^2 + \ldots\Big) \\
&= \frac{2\pi N(E_f)\tau}{\hbar} \left(1 - \tau/\tau_\varphi - Dq^2\tau\right). \qquad (7.59)
\end{aligned}$$

Đặt (7.55) và (7.58) vào (7.56), được

$$\wedge(q) = \frac{h}{2\pi N(E_f)\tau}\ \frac{1}{Dq^2\tau + \tau/\tau_\varphi}. \tag{7.60}$$

Thay kết quả nhận được (7.60) vào (7.54), ta có bổ chính vào độ dẫn:

$$\delta\sigma_{xx} = -\frac{e^2}{\pi\hbar}(D\tau)\,2\int\frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2}\ \frac{1}{Dq^2\tau + \tau/\tau_\varphi}. \tag{7.61}$$

Ở đây, ta nhân thêm hệ số 2, tính đến cả hai phương của spin. Rõ ràng là biểu thức dưới dấu tích phân sẽ phân kỳ khi $q \to 0$ (tương ứng $\tau_\varphi \to \infty$). Kỳ dị này thường gọi là cực khuyếch tán (diffusion pole). Như vậy, đóng góp chủ yếu vào tích phân (7.61) là từ miền giá trị nhỏ của q, và do đó ta có thể gần đúng giới hạn tính tích phân trong miền $q \le 1/\sqrt{D\tau} \sim 1/l$ (l là quãng đường tự do trung bình), nghĩa là:

$$\begin{aligned}\delta\sigma_{xx} &= -\frac{2e^2}{\pi\hbar}\frac{1}{(2\pi)^2}(D\tau)\int_0^{1/\sqrt{D\tau}}\pi dq^2\,\frac{1}{Dq^2\tau + \tau/\tau_\varphi}\\ &= -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar}\ln\left(1 + \tau_\varphi/\tau\right).\end{aligned} \tag{7.62}$$

Đây là biểu thức bổ chính lượng tử vào độ dẫn điện của các hệ hai chiều. Bằng cách hoàn toàn tương tự, chỉ với chú ý như nêu trong thảo luận bổ sung (B7.3), dễ dàng nhận được bổ chính cho các hệ ba và một chiều.

$$\delta\sigma = -\frac{e^2}{\pi\hbar}\begin{cases}\frac{1}{2\pi l_\varphi}\left(\sqrt{1 + \tau/\tau_\varphi} - 1\right) & ;\ 3D\\ l_\varphi\left(1 - \sqrt{\tau/(\tau + \tau_\varphi)}\right) & ;\ 1D,\end{cases} \tag{7.63}$$

trong đó $l_\varphi = \sqrt{D\tau_\varphi}$.

Đại lượng $\wedge$ (7.60) là một hàm truyền khuếch tán. Nó có dạng giống như hàm Green (mặc dù $\wedge$ là thực). Chú ý rằng, hàm này không có mặt trong các giản đồ thang của cặp electron - lỗ trống. Tuy nhiên, do đối xứng đảo chiều thời gian giữa hai loại giản đồ, thuật ngữ "hàm truyền khuyếch tán" (diffusion propagator) thường dùng cho cả hai loại giản đồ thang của cặp electron - lỗ trống (hình 7.3 (a)) và cặp electron-electron (hình 7.8). Khi đó, để phân biệt, đại lượng $\wedge$ (7.60) còn gọi là hàm truyền Cooper (cooperon propagator).

7.5 Định xứ Anderson

Vật lý hiện đại của các hệ không trật tự chủ yếu dựa trên những tiến bộ trong hiểu biết về hai hiện tượng cơ bản: định xứ Anderson và tương tác electron electron.

7.5.1 Định xứ Anderson và chuyển pha Mott

Năm 1958 Anderson công bố bài báo kinh điển (sau này được trao giải thưởng Nobel), trong đó ông chứng minh rằng, dưới tác dung của thế ngẫu nhiên dáng điệu của hàm sóng electron có thể bị thay đổi một cách cơ bản, trở thành định xứ, nếu độ ngẫu nhiên đủ mạnh.

Anderson xét một mô hình liên kết mạnh mô tả bằng Hamiltonian (Anderson 1958):

$$\mathcal{H} = \sum_i \varepsilon_i a_i^+ a_i + V \sum_{\langle ij \rangle} a_i^+ a_j + \text{h.c.} \,, \tag{7.64}$$

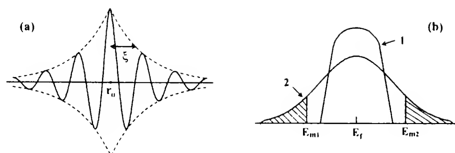
trong đó $\langle ij \rangle$ ngụ ý chỉ tính đến tương quan giữa các nút lân cận gần nhất: yếu tố chéo ε_i là ngẫu nhiên, tuân theo phân bố đều:

$$p(\varepsilon) = \begin{cases} 1/2W & \text{nếu } |\varepsilon| < W \\ 0 & \text{nếu } |\varepsilon| > W. \end{cases}$$

Bài toán này có hai tham số: V đặc trưng cho mức độ phủ nhau của hàm sóng electron ở các nút lân cận gần nhất (khả năng lan truyền) và W là số đo mức độ mất trật tự của hệ. Anderson chứng minh rằng, với mỗi loại mạng, tồn tại một giá trị ngưỡng $(W/V)_c$ mà nếu $(W/V) \ll (W/V)_c$ thì trạng thái electron trong hệ có thể lan truyền ra xa (trạng thái lan truyền - extended states), còn nếu $(W/V) \gg (W/V)_c$ thì trạng thái electron bị định xứ (localized states):

$$|\psi(\mathbf{r})| \propto \exp\left(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/\xi\right), \tag{7.65}$$

trong đó ξ là độ dài định xứ (localization length), kích thước đặc trưng của trạng thái (xem hình 7.10 (a)).



Hình 7.10: Minh họa: (a) Trạng thái định xứ tại r_0 với độ dài định xứ ξ;
(b) Cấu trúc vùng: 1 vật liệu tinh khiết; 2 vật liệu không trật tự;
các trạng thái ở đuôi vùng bị định xứ (phần gạch chéo);
E_{m_1}, E_{m_2} là các ngưỡng linh động.

Anderson nhận được kết quả trên bằng sử dụng lý thuyết nhiễu loạn. Sau này một lượng lớn các công trình tính toán số (Licciardello and Thouless 1975, MacKinnon and Kramer 1983) đã khẳng định kết luận của Anderson, đồng thời cho giá trị cụ thể của $(W/V)_c$ đối với các loại mạng khác nhau, chẳng hạn với mạng lập phương đơn giản $(W/V)_c \approx 15$, với hypercube bốn chiều $(W/V)_c \approx 24$.

Mott là người đầu tiên đã mang lại cho mô hình Anderson một nội dung vật lý cụ thể, làm cho nó trở nên "đo được". Theo Mott (Mott 1966), mất trật tự (thăng giáng) dẫn đến xuất hiện các trạng thái trong vùng cấm. Các trạng thái ở đuôi vùng (nơi mật độ trạng thái nhỏ) bị định xứ. Các trạng thái định xứ phân tách với các trạng thái truyền qua bằng một ranh giới, gọi là ngưỡng linh động (mobility edge), như mô tả bằng E_{m_1} và E_{m_2} trên hình 7.10 (b). Nếu mức Fermi E_f nằm trong miền các trạng thái truyền qua (như trên hình 7.10 (b)) thì độ dẫn điện ở nhiệt độ không $\sigma\,(T = 0)$ của hệ có giá trị khác không. Còn, nếu E_f nằm trong vùng các trạng thái định xứ (vùng gạch chéo trên hình 7.10 (b)) thì $\sigma\,(T = 0) \to 0$. Bằng cách như vậy, Mott đã gắn định xứ với $\sigma\,(T = 0)$ (là đại lượng đo được): $\sigma\,(T = 0)$ là hữu hạn nếu $(W/V) \ll (W/V)_c$ và $\sigma\,(T = 0) \to 0$ nếu $(W/V) \gg (W/V)_c$.

Hơn nữa, Mott còn đề xuất một cơ chế chuyển pha kim loại - điện môi. Trong thực nghiệm, người ta có thể dịch chuyển vị trí mức Fermi E_f bằng thay đổi mật độ electron. Đồng thời, vị trí các ngưỡng linh động cũng có thể xê dịch bằng thay đổi nồng độ tạp. Thành ra, bằng thay đổi nồng độ tạp

hoặc thay đổi mật độ electron ta có thể thay đổi vị trí tương đối giữa mức Fermi E_f và ngưỡng linh động, chuyển hệ từ trạng thái kim loại, ứng với mức Fermi nằm trong vùng truyền qua và $\sigma\,(T=0) \neq 0$, sang trạng thái điện môi, ứng với mức Fermi nằm trong vùng định xứ và $\sigma\,(T=0) \to 0$. Loại chuyển pha kim loại - điện môi như vậy đã quan sát được chẳng hạn ở các bán dẫn pha tạp (doped semiconductors) (xem Pepper 1982).

Một câu hỏi quan trọng: chuyển pha này xảy ra một cách liên tục (loại hai) hay gián đoạn (loại một) ? Mott cho rằng, nó xảy ra một cách gián đoạn. Ông lý luận như sau (Mott 1974). Giả sử ở gần điểm chuyển pha, lý thuyết Boltzmann vẫn còn đúng, nghĩa là ta vẫn có thể sử dụng công thức Drude:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \equiv \frac{e^2}{\hbar}\,\frac{n}{k_F^2}\,(lk_F)\,.$$

Ở đây ta đã sử dụng $l = v_f\tau \equiv (\hbar k_F/m)\,\tau$. Điều kiện Ioffe-Regel đòi hỏi $lk_f > 1$ (tiết 1.6), do đó:

$$\sigma > \frac{e^2}{\hbar}.\frac{n}{k_F^2} = C_3\,\frac{e^2}{\hbar}k_F = \sigma_{\min}\,(3D)\,. \tag{7.66}$$

Độ dẫn điện trong các hệ ba chiều ($3D$) không thể nhỏ hơn $\sigma_{min}\,(3D)$ (7.66), hay nói cách khác, với các hệ kim loại ba chiều tồn tại một độ dẫn kim loại cực tiểu (minimum metallic conductivity) (7.66), mà trong đó C_3 là một hệ số. Theo đánh giá của Mott $C_3 \approx 0.01 \div 0.05$. Ví-dụ, nếu $k_F = 10^8 cm^{-1}$ và lấy $C_3 = 0.03$ thì $\sigma_{min}\,(3D) \approx 10^3\Omega^{-1}cm^{-1}$.

Hoàn toàn tương tự, ta dễ dàng dẫn ra biểu thức cho độ dẫn kim loại cực tiểu trong các hệ hai chiều

$$\sigma_{min}\,(2D) = C_2\,e^2/\hbar\,. \tag{7.67}$$

Độ dẫn cực tiểu $\sigma_{min}\,(2D)$ có dạng rất tổng quát, không phụ thuộc vào một tham số vật liệu nào.

Vấn đề về khả năng tồn tại độ dẫn kim loại cực tiểu sẽ còn được thảo luận trong phần tiếp theo của tiết này. Về mặt thực nghiệm, mặc dù thời gian đầu đã có nhiều số liệu ủng hộ quan điểm của Mott, đa phần các phép đo về sau khẳng định rằng, chuyển pha xảy ra một cách liên tục, nghĩa là

không tồn tại độ dẫn kim loại cực tiểu (Shklovskii and Efros 1984, Lee and Ramakrishnan 1985).

7.5.2 Lý thuyết tỷ lệ về định xứ Anderson

Những ý tưởng đầu tiên về một lý thuyết tỷ lệ (Scaling Theory) của định xứ Anderson đã được hình thành trong các bài báo của Thouless và đồng tác giả (Thouless 1974, Licciardello and Thouless 1975). Trong khi Mott gắn định xứ cũng như chuyển pha với độ dẫn điện (conductivity), Thouless cho rằng vị trí đó không phải của độ dẫn, mà là của conductance.

Nếu mẫu đo có dạng một hypercube d chiều với cạnh L, thì giữa conductance G và độ dẫn điện σ có hệ thức:

$$G = \sigma . L^{d-2}. \tag{7.68}$$

Ta thấy, trong khi σ không phụ thuộc kích thước của hệ, thì G có phụ thuộc; trong khi đơn vị đo của σ phụ thuộc vào số chiều của hệ (cm^{-1} với $d = 2$ và $cm^{-1}\Omega^{-1}$ với $d = 3$), thì đơn vị đo của G là như nhau (Ω^{-1}), không phụ thuộc d. Sau này, thay cho G, ta sẽ làm việc với conductance không thứ nguyên (dimensionless conductance), định nghĩa là:

$$g = G/\left(e^2/\hbar\right). \tag{7.69}$$

Thouless cho rằng, chính g là đại lượng vật lý liên quan trực tiếp với định xứ cũng như chuyển pha. Điều này có thể hiểu một cách định tính như sau:

Vì tham số duy nhất của mô hình Anderson là W/V, giả thiết của Thouless chỉ đúng nếu như tồn tại một tương quan duy nhất giữa W/V và g. Để tìm tương quan này Thouless tưởng tượng việc xây dựng một hypercube $(2L)^d$ (d chiều, cạnh L) bằng cách ghép các hypercube $(L)^d$ (chẳng hạn, ghép bốn hình vuông cạnh L thành một hình vuông cạnh $2L$). Giả sử ta có thể chéo hóa Hamiltonian (7.64) cho hypercube $(L)^d$, nghĩa là biết hàm riêng và trị riêng của nó. Khi đó, hàm riêng của hypercube $(2L)^d$ cũng có thể biết, chẳng hạn bằng tổ hợp tuyến tính các hàm riêng của mẫu $(L)^d$. Nhưng các mẫu $(L)^d$ mô tả bằng Hamiltonian (7.64) với độ mất trật tự,

đặc trưng bởi tham số W, có các mức năng lượng thăng giáng ngẫu nhiên. Khoảng cách điển hình giữa các mức ngẫu nhiên này tỷ lệ với W:

$$W \equiv W_L \sim \left(N_L(E)\,L^d\right)^{-1}, \tag{7.70}$$

trong đó $N_L(E)$ là mật độ trạng thái. Mặt khác, hằng số phủ V_L có thể xác định như năng lượng liên quan với sự chuyển electron giữa các mẫu con $(L)^d$:

$$V \equiv V_L \sim \hbar/\tau_L = \hbar D/L^2. \tag{7.71}$$

Ở đây, τ_L là thời gian sống đặc trưng của electron trong mẫu $(L)^d$, $\tau_L = L^2/D$ với D là hằng số khuyếch tán. Phối hợp (7.70) và (7.71), ta được

$$\frac{V_L}{W_L} \approx \frac{\hbar}{L^2} D N_L(E)\,L^d\ .$$

Sử dụng hệ thức Einstein $D = \sigma/e^2 N_L(E)$, ta viết tiếp:

$$\frac{V_L}{W_L} \approx \left(\frac{\hbar}{e^2}\right)\sigma L^{d-2} = g_L. \tag{7.72}$$

Như vậy, quả là có một hệ thức đơn giản giữa (V/W) và g. Nói khác, g đúng là đại lượng vật lý đặc trưng của hiện tượng định xứ Anderson. Lưu ý rằng, khi dẫn ra (7.72), chúng tôi không có ý định tìm một hệ thức chính xác, mà chỉ muốn chứng tỏ mối tương quan đơn nhất giữa hai đại lượng. Thực ra, hệ thức giữa chúng thậm chí có thể không tuyến tính (xem chẳng hạn, Anderson and Lee 1980).

Trở lại thí nghiệm tưởng tượng của Thouless. Giả sử ta xuất phát từ hypercube ban đầu với kích thước $(L)^d = (l)^d$, ở đây l là quãng đường tự do trung bình, bằng ghép lại từng bước, tạo các hypercube $(2L)^d$, rồi $(4L)^d$ và vv. Gọi $g_0 \equiv g(l)$ là conductance của hypercube $(l)^d$, câu hỏi đặt ra là: g thay đổi thế nào khi kích thước của hypercube tăng mãi cho đến khi đạt kích thước của các mẫu đo thông thường? Trả lời câu hỏi này chính là nội dung của lý thuyết scaling về định xứ.

Trước hết ta xem xét hai trường hợp giới hạn.

Trường hợp giới hạn mất trật tự yếu. Hàm sóng electron có dáng điệu lan truyền, giống như sóng phẳng; $l \gg k_f^{-1}$, lý thuyết Boltzmann vẫn làm việc và ta vẫn có thể sử dụng công thức Drude:

$$\sigma = ne^2\tau/m = ne^2l/\hbar k_f \ .$$

Độ dẫn σ không phụ thuộc vào kích thước của hệ. Còn, conductance phụ thuộc vào L theo (7.68):

$$g(L) = \sigma L^{d-2}\left(\frac{e^2}{\hbar}\right)^{-1} . \qquad (7.73)$$

Đây chính là dạng phụ thuộc kích thước của conductance ở giới hạn định xứ yếu của kim loại.

Trường hợp giới hạn mất trật tự mạnh. Các trạng thái gần mức Fermi bị định xứ dạng (7.65). Ở nhiệt độ thấp, electron nhảy dọc theo các trạng thái định xứ với xác suất giảm theo hàm e mũ khi khoảng cách tăng. Khi kích thước của mẫu đo đủ lớn, $L \gg \xi > l$, conductance của hệ trở nên có dạng:

$$g(L) \propto \exp(-L/\xi) \ . \qquad (7.74)$$

Đây chính là dạng phụ thuộc kích thước của conductance trong giới hạn mất trật tự mạnh của điện môi.

Với độ mất trật tự trung gian nào đó, khi kích thước của mẫu tăng dần từ l, đại lượng $g(L)$ thay đổi liên tục, trơn tru từ $g(l) = g_0$ và sẽ dần tiến tới một trong hai giới hạn (7.73) hoặc (7.74) khi L đủ lớn. Xuất phát từ ý tưởng "scaling" của Thouless, kết hợp với các biểu thức giới hạn (7.73) và (7.74), Abrahams và đồng tác giả đã đề xuất hệ thức tổng quát cho dạng phụ thuộc $g(L)$ (Abrahams *et al.* 1979):

$$\frac{d\ln g}{d\ln L} = \beta(g) \ . \qquad (7.75)$$

Với $\beta(g)$ là hàm chỉ của g, không phụ thuộc L cũng như các tham số vật liệu khác. Mặc dù không có một cơ sở thật là chắc chắn về mặt lý thuyết, hệ thức scaling (7.75) phù hợp với kết quả của lý thuyết nhiễu loạn (Gorkov *et al.* 1979, Abrahams and Ramakrishnan 1980) và được sự ủng hộ của một

lượng lớn các công trình tính toán số (chẳng hạn, Lee and Fisher 1981). Hệ thức (7.75) còn dẫn đến những tiên đoán rất quan trọng và cũng rất bất ngờ. Vì vậy, mặc dù vẫn còn những câu hỏi chưa được trả lời, những phê phán chưa được thảo luận thích đáng, hệ thức scaling (7.75) của Abrahams và đồng tác giả vẫn giữ vai trò trung tâm trong lý thuyết hiện đại về các hệ không trật tự.

Ta xét dạng cụ thể của hàm β cho hai trường hợp giới hạn.

Với giới hạn mất trật tự yếu (hay là g lớn), sử dụng $g\,(L)$ (7.73) ta có

$$\beta\,(g) = d - 2\ .$$

Trong giới hạn này lý thuyết nhiễu loạn vẫn làm việc tốt. Nó dẫn đến một bổ chính vào biểu thức trên, dạng $\propto g^{-1}$. Và, như vậy:

$$\beta\,(g) = d - 2 - C_d/g \quad (g \text{ lớn})\ , \tag{7.76}$$

trong đó C_d là một hằng số dương (Gorkov *et al.* 1979).

Với giới hạn mất trật tự mạnh (hay là g nhỏ), sử dụng $g\,(L)$ (7.74) có

$$\beta\,(g) = \ln g + \text{const.} \quad (g \text{ nhỏ})\ . \tag{7.77}$$

Ở đây $g \ll 1$ và hằng số "const." có giá trị cỡ đơn vị, nên $\beta\,(g) < 0$.

Bây giờ ta có thể vẽ đường cong scaling đầy đủ bằng cách thác triển liên tục và đơn điệu giữa hai giới hạn (7.76) và (7.77) cho các trường hợp $d = 3$, 2 và 1 như trên hình 7.11.

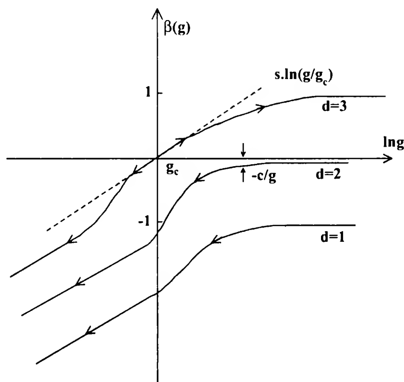
a. Trường hợp ba chiều (d = 3)

Ở giới hạn g lớn, $\beta\,(g) \to 1$ theo (7.76), trong khi với $g \ll 1$, theo (7.77), $\beta\,(g) < 0$. Như vậy, đường cong $\beta\,(g)$ phải cắt trục hoành tại một điểm $g = g_c$ nào đó (chọn làm gốc hệ trục toạ độ trên hình 7.11). Ở lân cận g_c, đường cong $\beta\,(g)$ có thể gần đúng mô tả bằng

$$\beta\,(g) \approx s\ln\,(g/g_c)\,;\ |g - g_c|/g_c \ll 1. \tag{7.78}$$

Các hằng số g_c và s có vai trò quan trọng, có thể tính bằng gần đúng giải tích (Vollhardt and Wölfle 1982) hoặc mô phỏng số (Stein and Krey 1980,

Kramer and MacKinnon 1993). Các kết quả thống nhất với nhau, cho s có giá trị cỡ đơn vị (nhưng không chính xác bằng 1), còn $g_c \approx 2 \div 3$.



Hình 7.11: Các đường cong scaling, $\beta(g)$ biểu-diễn theo $\ln g$, cho các hệ 3, 2 và 1 chiều. Mũi tên chỉ chiều tiến triển của g khi tăng kích thước của hệ.

Xuất phát từ conductance $g_0 \equiv g(l)$ của hypercube vi mô kích thước l (quãng đường tự do trung bình), ta quan tâm xem $g(L)$ tiến triển thế nào khi kích thước của mẫu tăng lên mãi $L = l$, $2l$, $4l$ ... Có hai khả năng.

Một là với $g_0 > g_c$. Điểm xuất phát nằm ở nửa bên phải của trục hoành trên hình 7.11, nên $\beta(g) > 0$. Theo (7.75), điều đó nghĩa là, khi L tăng, g đơn điệu tăng, và khi L đủ lớn, $\beta \to 1$ (giới hạn mất trật tự yếu), hệ mang tính kim loại.

Hai là với $g_0 < g_c$. Điểm xuất phát nằm ở nửa bên trái của trục hoành trên hình 7.11, nên $\beta(g) < 0$. Điều đó nghĩa là, với $g_0 < g_c$, conductance g đơn điệu giảm khi L tăng, hệ "chảy" xuống theo chiều mũi tên trên hình 7.11 và tiến về trạng thái điện môi với $\beta(g)$ có dáng điệu mất trật tự mạnh (7.77) khi L đủ lớn.

Tại $g = g_c$, có $\beta(g) = 0$, conductance không phụ thuộc vào L. Điều này nghĩa là, nếu ở một kích thước nào đó conductance của mẫu đo bằng g_c, thì nó sẽ bằng g_c ở mọi kích thước, kể cả khi $L \to \infty$. Hệ quả là, tại $g = g_c$ độ dẫn điện của hệ $\sigma \propto g_c L^{2-d} = g_c/L \to 0$ khi $L \to \infty$. Theo thuật ngữ của lý thuyết nhóm tái chuẩn hóa (Wilson and Fisher 1972), điểm $g = g_c$ được gọi là điểm ổn định (fixed point) và lý thuyết scaling tiên đoán có chuyển pha kim loại - điện môi trong các hệ ba chiều tại điểm này. Theo lý thuyết scaling, mọi hệ (vật liệu) ba chiều đều "nằm" trên một đường cong $\beta(g)$ chung. Sự khác nhau giữa các vật liệu là ở conductance vi mô g_0: tất cả vật liệu có $g_0 > g_c$ đều là kim loại (vật dẫn), còn các vật liệu có $g_0 < g_c$ đều là điện môi. Tham số "điều hành" sự chuyển giữa hai trạng thái (kim loại và điện môi) là $\varepsilon = |g_0 - g_c|/g_c$.

Ta xem xét miền lân cận của điểm chuyển pha, $\varepsilon \ll 1$. Trong miền này $\beta(g)$ có thể mô tả bằng (7.78). Gọi ξ là kích thước điển hình, mà khi $L > \xi$, đường cong $\beta(g)$ rời khỏi chế độ (7.78) chuyển sang dáng điệu của hệ vĩ mô ((7.76) hoặc (7.77)), thì ξ đóng vai trò như độ dài tương quan (correlation length) trong lý thuyết chuyển pha và có thể đánh giá bằng cách như sau. Tích phân từ l đến ξ hai vế của đẳng thức $d\ln g/d\ln L = s\ln(g/g_c)$ cho

$$\frac{\ln(g(\xi)/g_c)}{\ln(g_0/g_c)} = (\xi/l)^s \; .$$

Từ đây suy ra

$$\xi \sim l\,\frac{\text{const}}{\varepsilon^{1/s}} \propto l\,\varepsilon^{-\nu}. \qquad (7.79)$$

Ở đây, ta đã đưa vào $\nu = 1/s$, ký hiệu quen thuộc của chỉ số tới hạn (critical exponent) liên quan với độ dài tương quan trong lý thuyết chuyển pha. Chỉ số này xác định đặc trưng phân kỳ của ξ khi $\varepsilon \to 0$ (dần tới điểm chuyển).

Một hệ quả quan trọng nữa của hàm scaling $\beta(g)$ trong trường hợp ba chiều là về dáng điệu của chuyển pha kim loại - điện môi. Ở trên ta đã nhận xét, tại $g = g_c$, độ dẫn $\sigma \to 0$ khi $L \to \infty$. Ở lân cận g_c, khi L thay đổi từ l đến ξ thì conductance g thay đổi không quá một bậc giá trị, và do đó độ dẫn kim loại vĩ mô có thể đánh giá bằng

$$\sigma \sim \sigma(L = \xi) \sim \frac{\text{const}}{\xi^{d-2}} \sim \varepsilon^{(d-2)\nu} \qquad (7.80)$$

Hóa ra, dáng điệu tới hạn của σ được xác định bằng cùng chỉ số ν như ξ. Khi $\varepsilon \to 0$, tức là dần tới điểm chuyển pha, $\xi \to \infty$, còn $\sigma \to 0$. Theo (7.80), rõ ràng độ dẫn σ tiến tới 0 một cách liên tục. Nói khác, theo lý thuyết scaling thì chuyển pha kim loại - điện môi xảy ra một cách liên tục, đó là chuyển pha loại hai. Và như vậy, lý thuyết scaling về định xứ phủ nhận sự tồn tại của độ dẫn kim loại cực tiểu do Mott đề xuất.

b. Trường hợp hai chiều (d = 2)

Vì ngay cả ở giới hạn trên, $\beta(g) = d - 2 - C_2/g = -C_2/g$ cũng là âm, nên với g_0 xuất-phát bất kỳ, g luôn đơn điệu giảm khi L tăng và hệ luôn "chảy" xuống giới hạn mất trật tự mạnh với $g(L) \propto \exp(-L/\xi)$ khi L đủ lớn. Nói khác, lý thuyết scaling tiên đoán rằng, hệ hai chiều bất kỳ, dù với độ mất trật tự yếu đến đâu chăng nữa, cũng không bao giờ tồn tại ở trạng thái kim loại.

Tương tự với trường hợp ba chiều, ta cũng có thể đánh giá kích thước đặc trưng ξ, mà ở đó hệ bắt đầu rời khỏi chế độ $\beta(g) \approx -C_2/g$, chuyển sang dáng điệu vĩ mô của giới hạn mất trật tự mạnh (7.77). Muốn vậy, ta tích phân hai vế đẳng thức $d\ln g/d\ln L = -C_2/g$ với cận lấy từ l đến ξ. Kết quả cho

$$g(\xi) = g_0 - C_2 \ln(\xi/l).$$

Lưu ý rằng ở kích thước ξ conductance $g(\xi)$ đã là rất nhỏ, và do đó có thể gần đúng:

$$\xi \approx l \exp(g_0/C_2) \ . \tag{7.81}$$

Nếu lấy $C_2 = 1/\pi^2$ còn $g_0 = k_f l/2\pi$ (xem Lee and Ramakrishnan 1985), thì $\xi \approx l \exp(\pi k_f l/2)$ và trở nên khá lớn trong giới hạn mất trật tự yếu với $k_f l \gg 1$. Nói khác, trong hệ hai chiều định xứ thường là yếu và do đó khó quan sát.

c. Trường hợp một chiều (d = 1)

Tương tự như trường hợp hai chiều, vì $\beta(g)$ luôn âm, nên dù g_0 như thế nào, thì khi kích thước L tăng, hệ luôn "chảy" xuống giới hạn mất trật tự mạnh, tức là trong các hệ một chiều không tồn tại trạng thái kim loại. Thực ra điều này đã được nêu ra từ nhiều năm trước: do tán xạ trở lại nhiều lần,

tất cả các trạng thái trong hệ một chiều luôn bị định xứ (Mott and Twose 1961; Landauer 1957).

Ta có thể đánh giá độ dài định xứ ξ bằng cùng một cách như với hệ hai chiều. Tích phân đẳng thức $d \ln g / d \ln L = -1 - C_1/g$ từ l đến ξ rồi xem $g(\xi)$ là nhỏ, bỏ qua, ta dễ dàng nhận được

$$\xi \approx l. \tag{7.82}$$

Trong hệ một chiều độ dài định xứ rất nhỏ (chỉ cỡ quãng đường tự do trung bình), nghĩa là các trạng thái electron bị định xứ mạnh.

Để kết thúc tiết này ta nêu lại những tiên đoán quan trọng nhất của lý thuyết scaling về định xứ: (i) có chuyển pha kim loại - điện môi trong các hệ ba chiều; (ii) chuyển pha xảy ra một cách liên tục; và (iii) không tồn tại trạng thái kim loại trong các hệ hai và một chiều. Mặc dù các kết luận này được suy ra từ một lý thuyết rất đơn giản (không tương tác, một tham số), chúng đã nhận được sự ủng hộ của rất nhiều kết quả tính toán số cũng như kết quả thực nghiệm ở các hệ (vật liệu, cấu trúc) khác nhau. Độc giả nào quan tâm chi tiết vấn đề này có thể tìm hiểu ở Shklovskii and Efros 1984, Lee and Ramakrishnan 1985, hay Imry 1997. Chúng tôi chỉ muốn giới thiệu rằng, kể từ công bố của Kravchenko *et al.* 1995 cho đến nay, đã có một số đáng kể các kết quả thực nghiệm khẳng định sự tồn tại của trạng thái kim loại trong hệ hai chiều. Về mặt lý thuyết, hiện có một ý kiến tương đối thống nhất là, trạng thái kim loại (nếu tồn tại thật) hẳn phải là hệ quả của tương tác electron- electron, một hiệu ứng chưa được tính đến trong lý thuyết scaling về định xứ của Abrahams và đồng tác giả (Abrahams *et al.* 1979). Tương tác electron-electron trong các hệ không trật tự dẫn đến nhiều hiệu ứng quan trọng và bất ngờ. Độc giả nào quan tâm vấn đề này có thể tham khảo ở Altshuler and Aronov 1985 (cho các hệ mất trật tự yếu); Shklovskii and Efros 1984, Nguyen *et al.* 1985 (cho các hệ mất trật tự mạnh).

Thảo luận bổ xung và bài tập

B7.1 Quãng đường tự do trung bình (mean free path) l là khoảng cách trung bình mà electron dịch chuyển được trước khi momentum ban đầu của nó bị phá hủy. Ở nhiệt độ thấp, tính chất dẫn truyền được xác định chủ yếu bởi các electron ở lân cận bề mặt Fermi, nên $l = v_f \tau_m$, trong đó v_f là vận tốc Fermi, τ_m là thời gian hồi chuyển momentum (momentum relaxation time). Thời gian τ_m thường lớn hơn nhiều thời gian va chạm.

Thời gian hồi chuyển pha (phase relaxation time, hay còn gọi, thời gian phá hủy pha phase breaking time) τ_φ là khoảng thời gian trung bình mà electron lưu giữ được ký ức về pha của mình. Thời gian này liên quan với độ dài kết hợp pha L_φ : $L_\varphi = v_f \tau_\varphi$ cho các bán dẫn có độ linh động electron cao, khi $\tau_\varphi \lesssim \tau_m$ hoặc $L_\varphi^2 = D\tau_\varphi$ cho vật liệu có độ linh động electron thấp, khi $\tau_\varphi \gg \tau_m$.

B7.2 Hệ thức (7.55) có thể nhận được bằng cách như sau. Khi tính trung bình theo cấu hình tạp của hàm Green, nếu ta dừng lại ở giản đồ năng lượng riêng bậc một (một tạp, hai đường tán xạ, một đường electron), thì năng lượng riêng đơn giản là

$$\Sigma^R = \sum_q |V(\mathbf{q})|^2 \frac{1}{E - E(\mathbf{k} - \mathbf{q}) + i\eta}$$

Sử dụng gần đúng (1.70):

$$\frac{1}{E - E(\mathbf{k} - \mathbf{q}) + i\eta} \approx -i\pi\delta(E - E(\mathbf{k} - \mathbf{q})),$$

ở đây, ta đã bỏ qua phần trị chính (thực) do tán xạ yếu như đã làm ở phần 7.4.1. Thực hiện chuyển

$$\sum_q \to \int\int \frac{\sin\theta\, d\theta\, d\varphi}{4\pi} \int N(E_q)\, dE_q\,;\ E_q = \hbar^2 q^2/2m\,,$$

ta sẽ nhận được, sau khi thay $E \to E_f$ (nhiệt độ thấp):

$$\Sigma^R = i\pi N(E_f) \int \frac{\sin\theta \, d\theta \, d\varphi}{4\pi} |V(\mathbf{q})|^2 = i\pi N(E_f) |V_q|^2 .$$

Dấu bằng cuối cùng ở trên là do tán xạ đẳng hướng ($V(\mathbf{q}) \equiv V_q$ bỏ ra ngoài tích phân).
Mặt khác, theo (7.48), $\Sigma^R = i\hbar/2\tau$. So sánh hai biểu thức của Σ^R ta nhận được (7.55): $|V_q|^2 = \hbar/2\pi N(E_f)\tau$.

B7.3 Trong tiết 7.4 ta phải lấy các tích phân dạng

$$\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} B(\mathbf{k}) \, G^R(E, \mathbf{k}) \, G^A(E', \mathbf{k}) ,$$

với $B(\mathbf{k})$ là một hàm của momentum, không có cực trị đặc biệt nào ở năng lượng Fermi. Khi đó, vì tích $G^R G^A$ có cực đại mạnh ở mức Fermi, ta có thể gần đúng tích phân trên bằng

$$N(E_f) \int \frac{d\Omega_k}{S_k} B(k_f) \int dE_k \, G^R(E, k) \, G^A(E', k) ,$$

trong đó $d\Omega_k$ là yếu tố góc vi phân, S_k là diện tích hình tròn bán kính đơn vị ($S_k = 2\pi$).

B7.4 Trong giới hạn định xứ (mất trật tự) yếu, quá trình dẫn điện chủ yếu xảy ra theo cơ chế khuyếch tán. Sử dụng phương trình khuyếch tán lượng tử ta có thể gần đúng nhận được các bổ chính (7.61) (7.63) một cách rất đơn giản. Về vai trò của tương tác electron-electron trong giới hạn này có thể tìm hiểu ở Altshuler and Aronov 1985. Trong giới hạn ngược lại của định xứ (mất trật tự) mạnh, dẫn điện chủ yếu xảy ra theo cơ chế nhảy (hopping conduction). Trong giới hạn này tương tác electron-electron cũng dẫn đến nhiều hiệu ứng quan trọng (Shklovskii and Efros 1984, Nguyen *et. al.* 1985).

Chương 8

Hàm Green với các hệ từ đồng nhất

Các hiện tượng từ rất phong phú. Tính trật tự từ liên quan với spin của electron được quan sát thấy ở nhiều vật liệu. Trong rất nhiều bài toán tạp chất, spin đóng vai trò quan trọng. Để giải thích các hiện tượng này hiện có rất nhiều loại mô hình spin khác nhau, trong đó hai loại chính là: mô hình các spin định xứ tương tác với nhau và mô hình các spin định xứ tương tác với các electron tự do. Trong phạm vi chương này chúng tôi không thể trình bày, dù chỉ là rất ngắn gọn, các mô hình spin, mà chỉ giới hạn ở việc giới thiệu một cách đơn giản phương pháp hàm Green trong các hệ spin đồng nhất. Độc giả nào quan tâm hơn về các hệ spin có thể tham khảo, chẳng hạn, Fisher 1965 hay Toda *et al.* 1983 (với các hệ spin đồng nhất); Mahan 2000 (hệ spin tạp), Majlis 2000.

8.1 Spin của electron

Mục đích của tiết này là giới thiệu tóm tắt các tính chất cơ bản của spin của electron. Nói chung, các toán tử spin một nửa (spin one half) có các thành phần xác định bằng (ở đây và trong cả chương này xem $\hbar = 1$):

$$\begin{aligned} S^{(x)} &= \frac{1}{2}\sigma_x \equiv \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ S^{(y)} &= \frac{1}{2}\sigma_y \equiv \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\ S^{(z)} &= \frac{1}{2}\sigma_z \equiv \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{8.1}$$

ở đây, x, y, z ngụ ý các tọa độ không gian thông thường; σ_x, σ_y, σ_z là các ma trận spin Pauli. Để ý là $S^{(z)}$ có dạng chéo với các trị riêng là $\pm 1/2$.

Các toán tử spin (8.1) tác dụng lên các trạng thái spin, biểu thị bằng vectơ chuẩn hóa dạng $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$, trong đó trạng thái $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ứng với spin hướng lên, còn $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ứng với spin hướng xuống. Tác dụng thực hiện như sau:

$$S^{(x)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$S^{(z)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \qquad (8.2)$$

Ta thấy $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ là hàm riêng, còn $1/2$ là trị riêng của $S^{(z)}$.

Các toán tử $S^{(x)}$, $S^{(y)}$ và $S^{(z)}$ quan hệ với nhau như các thành phần của một (giả) vectơ. Chẳng hạn, tích vô hướng của $\mathbf{S}_\ell$ và $\mathbf{S}_m$ có dạng:

$$\mathbf{S}_\ell \, \mathbf{S}_m = S_\ell^{(x)} \, S_m^{(x)} + S_\ell^{(y)} \, S_m^{(y)} + S_\ell^{(z)} \, S_m^{(z)}. \qquad (8.3)$$

Ở đây, các chỉ số ℓ, m ký hiệu vị trí định xứ của spin (nút mạng trong mô hình Heisenberg). Các toán tử spin ở các nút khác nhau, hay là liên quan với các electron khác nhau, là giao hoán với nhau. Các toán tử spin thành phần tuân theo hệ thức giao hoán:

$$\begin{aligned} \left[S_\ell^{(x)}, \, S_m^{(y)}\right] &= i \, S_\ell^{(z)} \, \delta_{\ell m} \, , \\ \left[S_\ell^{(y)}, \, S_m^{(z)}\right] &= i \, S_\ell^{(x)} \, \delta_{\ell m} \, , \\ \left[S_\ell^{(z)}, \, S_m^{(x)}\right] &= i \, S_\ell^{(y)} \, \delta_{\ell m} \, . \end{aligned} \qquad (8.4)$$

Ba toán tử $S^{(x)}$, $S^{(y)}$, và $S^{(z)}$ tạo thành một hệ cơ sở đầy đủ, qua đó có thể biểu diễn mọi biểu thức spin.

Trong thực tế tính toán, thay cho $S^{(x)}$ và $S^{(y)}$ người ta thường sử dụng

hai toán tử:

$$S^{(+)} = S^{(x)} + i\, S^{(y)}, \tag{8.5}$$

$$S^{(-)} = S^{(x)} - i\, S^{(y)}. \tag{8.6}$$

Các toán tử này tác dụng như sau:

$$S^{(+)}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + + \frac{i}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{8.7}$$

và tương tự

$$S^{(+)}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0, \tag{8.8}$$

$$S^{(-)}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{8.9}$$

$$S^{(-)}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0. \tag{8.10}$$

Toán tử $S^{(+)}$ nâng spin lên, $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, nên có tên là toán tử nâng (raising operator). Còn, toán tử $S^{(-)}$ hạ spin xuống, $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, nên có tên là toán tử hạ (lowering operator). Các hệ thức (8.7) - (8.10) cho thấy $S^{(+)}$ $\left(S^{(-)}\right)$ hành động giống như các toán tử sinh (hủy).

Bộ ba toán tử $S^{(+)}$, $S^{(-)}$ và $S^{(z)}$ cũng tạo thành một cơ sở đầy đủ, tương đương như bộ ba ($S^{(x)}$, $S^{(y)}$, $S^{(z)}$). Trong cơ sở này, tích vô hướng có dạng

$$\mathbf{S}_\ell \mathbf{S}_m = \frac{1}{2}\left(S_\ell^{(+)} S_m^{(-)} + S_\ell^{(-)} S_m^{(+)}\right) + S_\ell^{(z)} S_m^{(z)}. \tag{8.11}$$

Và, tương tự như (8.4), ta có các hệ thức giao hoán:

$$\begin{aligned} \left[S_\ell^{(+)}, S_m^{(-)}\right] &= 2\, S_\ell^{(z)}\, \delta_{\ell m}, \\ \left[S_\ell^{(-)}, S_m^{(z)}\right] &= S_\ell^{(-)}\, \delta_{\ell m}, \\ \left[S_\ell^{(z)}, S_m^{(+)}\right] &= S_\ell^{(+)}\, \delta_{\ell m}. \end{aligned} \tag{8.12}$$

Rõ ràng, ba toán tử $S^{(+)}$, $S^{(-)}$, và $S^{(z)}$ là không hoàn toàn tương đương. Toán tử $S_\ell^{(z)}$ có những đặc thù riêng, trong đó quan trọng là nó giao hoán với toán tử $\mathbf{S}_\ell \mathbf{S}_\ell$, nghĩa là chúng có cùng hệ hàm riêng. Nếu gọi S là spin toàn phần của hạt thì trị riêng của toán tử $\mathbf{S}_\ell \mathbf{S}_\ell$ là $S\,(S+1)$, còn trị riêng tương ứng của $S_\ell^{(z)}$ là: $-\,S,\ -\,S+1,\ \ldots S-1,\ S$ (tất cả $2S+1$ giá trị).

Ta có nhận xét, các hệ thức giao hoán của các toán tử spin không giống các hệ thức giao hoán của boson, cũng như của fermion, mà có dạng phức tạp hơn. Spin không phải là boson, cũng không phải là fermion. Và, vì các hệ thức giao hoán có vai trò quan trọng trong xây dựng Hamiltonian, dạng không bình thường của hệ thức giao hoán của các toán tử spin là một trong những nguyên nhân đầu tiên dẫn đến sự phức tạp của các bài toán loại này.

8.2 Mô hình Heisenberg

Trong mô hình Heisenberg người ta giả thiết rằng các spin định xứ tại các nút của một mạng đều đặn. Nếu gọi $\mathbf{S}_i$ là spin ở nút i thì Hamiltonian của hệ spin như vậy có dạng:

$$\mathcal{H} = -\sum_{i,j} J_{ij}\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j - g\mu_B \sum_i \mathbf{B}\mathbf{S}_i, \tag{8.13}$$

trong đó g là hệ số Lande (Lande's factor); μ_B là magneton Bohr (Bohr magneton); B là từ trường ngoài; J_{ij} là tích phân trao đổi (exchange integral, hay còn gọi là interaction strength, coupling) giữa hai spin $\mathbf{S}_i$ và $\mathbf{S}_j$: $J_{ij} > 0$ với tương tác sắt từ và $J_{ij} < 0$ với tương tác phản sắt từ. Trong mô hình này các spin là cùng loại (mô hình spin đồng nhất), tương tác là đẳng hướng. Nói chung, đại lượng J_{ij} giảm nhanh theo khoảng cách giữa hai nút i và j. Nếu chỉ tính đến tương tác giữa các spin ở các nút lân cận gần nhất và chọn trục z trùng với chiều của từ trường thì Hamiltonian (8.13) chuyển thành

$$\mathcal{H} = -J\sum_{\langle i,j\rangle} \mathbf{S}_i\mathbf{S}_j - g\mu_B B \sum_i S_i^{(z)}, \tag{8.14}$$

ở đây, với mọi cặp lân cận gần nhất $\langle i,j\rangle$ tích phân trao đổi là như nhau $J_{ij} \equiv J$ và tổng thứ nhất chỉ lấy theo các lân cận gần nhất. Mặc dù đã đơn

giản hơn rất nhiều so với các hệ spin thực, Hamiltonian (8.14), nói chung, vẫn không thể giải chính xác.

8.2.1 Gần đúng trường phân tử

Xét hệ sắt từ, tương tác với $J > 0$ gióng các spin song song với nhau. Giả sử rằng thăng giáng của spin xung quanh giá trị trung bình là đủ nhỏ để có thể bỏ qua các số hạng bậc hai theo thăng giáng. Khi đó, Hamiltonian (8.14) gần đúng chuyển về dạng:

$$\mathcal{H} = -2\,Jc \sum_{i} S_i^{(z)} \langle S \rangle - g\,\mu_B B \sum S_i^{(z)}\,, \tag{8.15}$$

với c là số lân cận gần nhất.

Lưu ý rằng, trong mô hình Heisenberg với từ trường **B** song song với trục **z**, ta luôn có thể đặt $\left\langle S_i^{(x)} \right\rangle = \left\langle S_i^{(y)} \right\rangle = 0$, mà vẫn không làm thay đổi bài toán. So sánh (8.15) với (8.14) ta thấy, ở (8.15) tương tác của một spin với tất cả các spin xung quanh trong từ trường ngoài đã được xem là tỷ lệ với tương tác của spin đó với một spin trung bình $\langle S \rangle$. Gần đúng như vậy gọi là gần đúng trường phân tử (cũng còn gọi là gần đúng Weiss hay gần đúng Bragg-Williams).

Hamiltonian (8.15) có thể viết lại dưới dạng tổng của các Hamiltonian một spin:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum \mathcal{H}_i, \\ \mathcal{H}_i &= \left(-2Jc\,\langle S \rangle - g\mu_B\, B\right) S_i. \end{aligned} \tag{8.16}$$

Tương ứng, với tổng thống kê (partition function), ta cũng có

$$\begin{aligned} Z &= Z_i^N, \\ Z_i &= \sum_{S_i} \exp\left(-\beta\,\mathcal{H}_i\right). \end{aligned} \tag{8.17}$$

Với spin $S_i = \pm 1/2$, tổng trong (8.17) với $\mathcal{H}_i$ (8.16) cho

$$Z_i = 2\cosh\left(\beta\left(Jc\,\langle S \rangle + g\mu_B B/2\right)\right). \tag{8.18}$$

Giá trị trung bình của spin là:

$$\langle S \rangle \equiv \langle S_i \rangle = \sum_{S_j} S_j \exp\left(-\beta \mathcal{H}_j\right) / Z_i \,.$$

Với Z_i (8.18), lấy tổng theo hai giá trị $S_j = \pm 1/2$, ta được

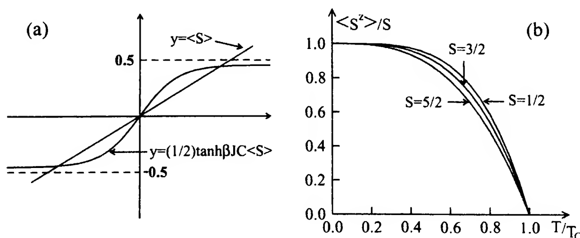
$$\langle S \rangle = \frac{1}{2} \tanh\left(\beta \left(Jc \langle S \rangle + g\mu_B B/2\right)\right) . \tag{8.19}$$

Nếu phương trình này có lời giải $\langle S \rangle \neq 0$ khi từ trường ngoài bằng không, thì hệ có mô men từ tự phát (spontaneous magnetic moment). Khi $B = 0$, phương trình (8.19) có dạng đơn giản

$$\langle S \rangle = \frac{1}{2} \tanh\left(\beta Jc \langle S \rangle\right) . \tag{8.20}$$

và có thể giải bằng phương pháp đồ thị như trên hình 8.1 (a). Từ hình này rõ ràng là, phương trình (8.20) có lời giải không tầm thường khi: $\beta Jc/2 \geq 1$ hay

$$T \leq Jc/2k_B \equiv T_c. \tag{8.21}$$



Hình 8.1: (a) Minh họa cho lời giải của (8.20).
(b) $\langle S^z \rangle / S$ như hàm của T/T_c với S khác nhau.

Như vậy, phương trình gần đúng trường phân tử (8.20) khẳng định sự tồn tại của nhiệt độ tới hạn T_c (8.21), mà ở nhiệt độ cao hơn T_c, hệ khảo sát

là thuận từ, còn ở $T < T_c$, hệ có mô men từ tự phát. Mô men từ trong một đơn vị thể tích được tính bằng:

$$M = \rho g \mu_B \langle S \rangle . \quad (8.22)$$

trong đó ρ là mật độ số spin (nút mạng).

Nhiệt độ T_c (8.21) đóng vai trò nhiệt độ Curie. Tại T_c đại lượng $\langle S \rangle \to 0$. Ở nhiệt độ thấp hơn và rất gần T_c, $T_c - T \ll T_c$, đại lượng $\langle S \rangle$ nhỏ, hàm $\tanh(x)$ ở (8.20) có thể khai triển thành chuỗi, giữ lại số hạng bậc 3, ta nhận được:

$$\langle S \rangle = \sqrt{3}\left[(T_c - T)/T_c\right]^{1/2} . \quad (8.23)$$

Và như vậy, ta nhận được dáng điệu phụ thuộc đặc trưng của tham số trật tự M:

$$M \propto \left[(T_c - T)/T_c\right]^{\beta} ;\ \beta = 1/2 . \quad (8.24)$$

Số mũ β trong (8.24) gọi là chỉ số tới hạn (critical exponent). Gần đúng trường phân tử cho $\beta = 1/2$. Giá trị thực nghiệm của β tùy thuộc vào vật liệu và thường cỡ $0.32 - 0.39$ (Patashinskii and Pokrovskii 1980). Còn giá trị tính số của β cho hệ ba chiều là 0.37 ± 0.04 (Ferrer *et al.* 1971).

Dáng điệu phụ thuộc nhiệt độ của $M(T)$ (8.24) (hay $\langle S \rangle$ (8.23)) được minh họa trên hình 8.1 (b). Bằng cách hoàn toàn tương tự như trên, ta có thể đánh giá dạng phụ thuộc $M(T)$ cho các giá trị khác của spin. Để so sánh, trên hình 8.1 (b) chúng tôi trình bày thêm (có tính minh họa) kết quả của hai trường hợp $S = 3/2$ và $5/2$.

Một điều cần nhắc đến là, phương trình gần đúng trường phân tử (8.20) dẫn đến sự tồn tại nhiệt độ Curie T_c ngay cả trong trường hợp một chiều. Đây là một điểm yếu quan trọng của gần đúng này, vì trong hệ một chiều không có chuyển pha. Nói chung, gần đúng trường phân tử cho bức tranh định tính chấp nhận được, thậm chí cho kết quả chính xác khi $T \to 0$, nhưng nó không thể cho kết quả định lượng đúng ở nhiệt độ cao. Nguyên nhân là, để dẫn ra phương trình (8.16) ta đã giả thiết thăng giáng của spin là nhỏ. Giả thiết này chỉ đúng ở nhiệt độ đủ thấp.

8.2.2 Gần đúng hàm Green

Trong gần đúng trường phân tử khi thay $\sum \mathbf{S}_i\mathbf{S}_j \to \sum S_i^{(z)} \langle S \rangle$, thực ra ta đã bỏ qua hai số hạng đầu so với số hạng thứ ba trong tích vô hướng (8.11). Khi không có từ trường ngoài, gần đúng như vậy chỉ có thể xem là chấp nhận được khi nhiệt độ rất thấp. Ở đây, ta sẽ xuất phát từ một Hamiltonian đầy đủ hơn và chỉ xét trường hợp không có từ trường ngoài:

$$\mathcal{H} = -2\left\langle S^{(z)}\right\rangle \sum_{ij} J_{ij} S_i^{(z)} - \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\left(S_i^{(+)}S_j^{(-)} + S_i^{(-)}S_j^{(+)}\right), \quad (8.25)$$

trong đó gần đúng bao gồm chỉ là bỏ qua thăng giáng của thành phần $S^{(z)}$. Ta đưa vào đại lượng H_{eff} xác định bằng

$$g\mu_B H_{\text{eff}} \equiv 2\left\langle S^{(z)}\right\rangle \sum_j J_{ij} \,. \quad (8.26)$$

Rõ ràng là đại lượng này có ý nghĩa như một trường hiệu dụng.

Tương ứng với gần đúng đang sử dụng, ta thay thế hệ thức giao hoán thứ nhất trong (8.12) bằng

$$\left[S^{(+)}, S^{(-)}\right] = 2\,S^{(z)} \longrightarrow 2\left\langle S^{(z)}\right\rangle. \quad (8.27)$$

Trong gần đúng như vậy, dễ thấy rằng phương trình chuyển động của $S_i^{+}(\tau)$ có dạng (xem bài tập B8.3)

$$\frac{\partial S_i^{+}}{\partial \tau} = -\,g\mu_B H_{\text{eff}} S_i^{+} + 2\sum_j J_{ij} S_j^{(+)} \left\langle S^{(z)}\right\rangle, \quad (8.28)$$

ở đây $\tau = it$ (xem tiết 3.1). Tương tự (3.52), ta định nghĩa hàm Green

$$\mathcal{G}(i,j;\tau) = -\left\langle T\, S_i^{(+)}(\tau)\, S_j^{(-)}(0)\right\rangle. \quad (8.29)$$

Các ký hiệu trong (8.29) có cùng ý nghĩa như ở hàm Green nhiệt độ (3.52); các chỉ số i, j vẫn là các chỉ số nút mạng như ở trên. Theo (8.28), hàm Green (8.29) thỏa mãn phương trình:

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial}{\partial \tau} + g\mu_B H_{\text{eff}}\right)\mathcal{G}(i,j;\tau) \;&=\; 2\sum J_{i\ell}\,\mathcal{G}(\ell,j;\tau)\left\langle S^{(z)}\right\rangle - \\ &\quad -\delta(\tau)\left\langle\left[S_i^{(+)}, S_j^{(-)}\right]\right\rangle. \quad (8.30)\end{aligned}$$

Hàm Green phụ thuộc tần số được xác định theo định nghĩa (3.47):

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(i\omega_n) &= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau}\mathcal{G}(\tau), & (8.31)\\ \mathcal{G}(\tau) &= \frac{1}{\beta}\sum_n e^{-i\omega_n\tau}\mathcal{G}(i\omega_n), & (8.32)\\ \omega_n &= 2n\pi/\beta. & (8.33)\end{aligned}$$

Với biến đổi này, phương trình (8.30) chuyển thành

$$\begin{aligned}(-i\omega_n + g\mu_B H_{\text{eff}})\mathcal{G}(i,j;\, i\omega_n) &= 2\sum J_{i\ell}\mathcal{G}(\ell,j;\, i\omega_n)\left\langle S^{(z)}\right\rangle \\ &\quad - 2\delta_{ij}\left\langle S^{(z)}\right\rangle. \qquad (8.34)\end{aligned}$$

Vì hệ mạng có tính đối xứng dịch chuyển, ta có thể giải phương trình này bằng thực hiện biến đổi Fourier theo biến không gian:

$$\mathcal{G}(l,j;\, i\omega_n) = N^{-1}\sum_k \exp\left[i\mathbf{k}(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j)\right]\mathcal{G}(\mathbf{k};\, i\omega_n). \qquad (8.35)$$

Khi đó, phương trình (8.34) trở nên có dạng

$$\begin{aligned}(-i\omega_n + g\mu_B H_{\text{eff}})\mathcal{G}(\mathbf{k};\, i\omega_n) &= 2J(\mathbf{k})\left\langle S^{(z)}\right\rangle\mathcal{G}(\mathbf{k};\, i\omega_n) \\ &\quad - 2\left\langle S^{(z)}\right\rangle, \qquad (8.36)\end{aligned}$$

trong đó

$$J(\mathbf{k}) = \sum_\ell \exp\left(-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_\ell - \mathbf{r}_j)\right)J_{\ell j}. \qquad (8.37)$$

Hệ thức (8.36) cho

$$\mathcal{G}(\mathbf{k},\, i\omega_n) = 2\left\langle S^{(z)}\right\rangle / \left[i\omega_n - g\mu_B H_{\text{eff}} + 2J(\mathbf{k})\left\langle S^{(z)}\right\rangle\right]. \qquad (8.38)$$

Tiếp theo, ta cần tìm một phương trình tự hợp cho $\left\langle S^{(z)}\right\rangle$. Nói chung, không tồn tại một phương pháp nhất quán trong giải quyết vấn đề này. Bogoliubov và Tyablikov đề xuất phương pháp tính cho trường hợp spin $1/2$ (Bogoliubov and Tyablikov 1959). Sau đó, Tahir-Kheli và ter Haar đã mở rộng phương pháp này cho các trường hợp spin cao hơn (Tahir - Kheli and

ter Haar 1962). Ở đây, ta sẽ giới hạn xét chỉ trường hợp spin 1/2. Trong trường hợp này, tại nút mạng bất kỳ, các toán tử spin thỏa mãn hai phương trình

$$S^2 = \left(S^{(z)}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(S^{(+)}S^{(-)} + S^{(-)}S^{(+)}\right) = S\left(S+1\right) = 3/4 \qquad (8.39)$$

và

$$\left(S^{(z)}\right)^2 = 1/4\,. \qquad (8.40)$$

Phối hợp (8.39) và (8.40) với hệ thức giao hoán:

$$S^{(+)}S^{(-)} - S^{(-)}S^{(+)} = 2S^{(z)}\,,$$

suy ra

$$S^{(+)}S^{(-)} = S\left(S+1\right) - \left(S^{z}\right)^2 + S^{(z)} = \frac{1}{2} + S^{(z)}. \qquad (8.41)$$

Trở lại định nghĩa hàm Green (8.29), ta có

$$\mathcal{G}\left(j,j;\,0_+\right) = -\left\langle S^{(+)}S^{(-)}\right\rangle = -\left(\frac{1}{2} + \left\langle S^{(z)}\right\rangle\right). \qquad (8.42)$$

Mặt khác, theo (8.38) ta lại có

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}\left(j,j;\,0_+\right) &= \frac{1}{\beta N}\sum_k\sum_n \frac{2\left\langle S^{(z)}\right\rangle \exp\left(-\,i\omega_n 0_+\right)}{i\omega_n - g\mu_B H_{\text{eff}} + 2J\left(\mathbf{k}\right)\left\langle S^{(z)}\right\rangle} \\
&= -\frac{2}{N}\left\langle S^{(z)}\right\rangle \sum_k \left[n\left(\mathbf{k}\right) + 1\right] \\
&= -\,2\left\langle S^{(z)}\right\rangle \left[\frac{1}{N}\sum n\left(\mathbf{k}\right) + 1\right], \qquad (8.43)
\end{aligned}$$

ở đây

$$n\left(\mathbf{k}\right) = \left\{\exp\left[\beta E\left(\mathbf{k}\right)\right] - 1\right\}^{-1} \qquad (8.44)$$

và

$$E\left(\mathbf{k}\right) = g\mu_B H_{\text{eff}} - 2J\left(\mathbf{k}\right)\left\langle S^{(z)}\right\rangle = 2\left\langle S^{(z)}\right\rangle\left[J\left(0\right) - J\left(\mathbf{k}\right)\right]\,. \qquad (8.45)$$

Trong biến đổi trên, để dẫn ra (8.43), ta đã sử dụng các hệ thức (8.32), (8.35) và tổng dạng (3.34), rồi sử dụng tiếp (8.26) để nhận được (8.45).

Từ (8.42) và (8.43) suy ra

$$\left\langle S^{(z)}\right\rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{N}\sum_{k} n\left(\mathbf{k}\right). \tag{8.46}$$

trong đó, $n\left(\mathbf{k}\right)$ lại phụ thuộc vào $\left\langle S^{(z)}\right\rangle$ theo (8.44) - (8.45). Như vậy, các hệ thức (8.46), (8.44), và (8.45) tạo thành một phương trình tự hợp đối với $\left\langle S^{(z)}\right\rangle$.

Đồng thời, theo (8.38) và (8.46), bằng thay $i\omega_n \to \omega + i\delta$. $\delta \to 0_+$ như ở (3.73), ta viết được

$$G\left(\mathbf{k}, \omega\right) = 2\left\langle S^{(z)}\right\rangle / \left[\omega - E\left(\mathbf{k}\right)\right]. \tag{8.47}$$

Ở đây, rõ ràng là, $E\left(\mathbf{k}\right)$ đóng vai trò năng lượng kích thích. Nếu mạng có tâm đối xứng, thì bằng khai triển (8.37), ta thấy khi $\mathbf{k} \to 0$,

$$E\left(\mathbf{k}\right) \propto k^2 \tag{8.48}$$

và $E\left(\mathbf{k}\right) \to 0$. Sự tồn tại các kích thích với năng lượng kích thích rất nhỏ là hệ quả chung của sự phá vỡ đối xứng - ở đây là đối xứng quay. Các kích thích lan truyền trong mạng dưới dạng sóng.

Phương trình (8.46) đã được giải bằng phương pháp số cũng như khai triển ở nhiệt độ thấp và ở lân cận T_c (Tyablikov 1967). Chỉ tính đến tương tác lân cận gần nhất, spin $S = 1/2$, ở nhiệt độ thấp, khai triển có dạng:

$$\left\langle S^{(z)}\right\rangle = \frac{1}{2} - a_0 - a_1 x^{5/2} - a_2 x^{7/2} \ldots - a_0^2 x^3 - 4a_0 a_1 x^4 \ldots, \tag{8.49}$$

trong đó

$$x = 3/2\pi\nu\beta J\left(0\right), \tag{8.50}$$

$$a_0 = \zeta\left(3/2\right); \; a_1 = \frac{3}{4}\pi\nu\zeta\left(5/2\right); \; a_2 = \pi^2\omega\nu^2\zeta\left(7/2\right), \tag{8.51}$$

với $\zeta\left(x\right)$ là hàm zeta Riemann (Riemann zeta function). Giá trị của ν và ω phụ thuộc vào loại mạng khảo sát. Chẳng hạn,

mạng lập phương đơn giản: $\nu = 1$; $\omega = 33/32$,

mạng lập phương tâm khối: $\nu = \frac{3}{4}2^{2/3}$; $\omega = 281/288$,

mạng lập phương tâm mặt: $\nu = 2^{1/3}$; $\omega = 15/16$.

Biểu thức khai triển (8.49) khác với khai triển nhiệt độ thấp chính xác của Dyson (Dyson 1956) chỉ ở các số hạng x^3 và x^4. Trong khai triển của Dyson không có số hạng x^3 và số hạng x^4 có một hệ số khác với ở (8.49). Nguyên nhân của sự khác nhau này là trong mô hình đang khảo sát ta đã bỏ qua tương tác giữa các sóng spin, trong khi Dyson đã tính đến tương tác này. Ortenburger chỉ ra rằng, nếu thay vì gần đúng ngay từ đầu như ở trên, ta viết hàm Green chính xác, rồi sau đó mới đưa vào gần đúng trước khi giải tự hợp, thì kết quả nhận được sẽ trùng với khai triển của Dyson đến số hạng x^4, tức là T^4 (Ortenburger 1964).

Ở lân cận nhiệt độ T_c về phía dưới, gần đúng hàm Green ở trên cho cùng dáng điệu phụ thuộc nhiệt độ của mô men từ tự phát như trong gần đúng trường phân tử (Tyablikov 1967):

$$M \propto \left[(T_c - T)/T_c\right]^{1/2} . \tag{8.52}$$

Hơn nữa, phương pháp hàm Green cũng hữu ích ngay cả khi nghiên cứu các sóng spin trong phản sắt từ cũng như ferit từ (ferrimagnets). Tất nhiên, vì không biết chính xác trạng thái cơ bản, nên trong các trường hợp này, kết quả chỉ có ý nghĩa định tính.

8.3 Mô hình Hubbard

Trong mô hình Heisenberg các spin định xứ ở nút mạng, nên mô hình này chỉ phù hợp để mô tả các vật liệu điện môi, trong đó các spin electron định xứ mạnh. Mô hình Heisenberg không thể mô tả các vật liệu kim loại, trong đó ít ra có một phần đáng kể các electron chuyển động gần như tự do. Trong khi đó, đa phần các vật liệu sắt từ lại là kim loại, như Fe, Ni hay Co. Để tìm một mô hình mô tả tính chất từ của kim loại ta phải tính đến chuyển động tự do của electron, tức là phải dựa vào cấu trúc vùng của vật liệu. Một mô hình loại như vậy, tương đối đơn giản mà vẫn mô tả được trạng thái sắt từ của vật liệu, đã được Hubbard đề xuất (Hubbard 1963, 1964). Trong mô hình của mình, ngoài năng lượng vùng, Hubbard đưa vào tương tác đẩy giữa

các electrons với spin trái ngược ở cùng một nút mạng. Hamiltonian có dạng

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j,\sigma} \varepsilon_{ij}\, a_{i\sigma}^{+}\, a_{j\sigma} + \frac{1}{2}\, U \sum n_{i\sigma} n_{i-\sigma}, \tag{8.53}$$

trong đó toán tử $a_{i\sigma}^{+}$ sinh một electron (trạng thái Wannier) tại nút i với spin σ, tham số U đặc trưng cho tương tác đẩy Coulomb giữa hai electron trên cùng một nút, còn

$$n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^{+}\, a_{i\sigma}. \tag{8.54}$$

Trước hết, ta xem xét mô hình (8.53) - (8.54) trong gần đúng trường phân tử. Ta giả thiết rằng thăng giáng của $n_{i\sigma}$ xung quanh giá trị trung bình $\langle n_{i\sigma}\rangle$ là nhỏ, để có thể viết (8.53) dưới dạng

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j,\sigma} \varepsilon_{ij}\, a_{i\sigma}^{+}\, a_{j\sigma} + U \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} \langle n_{i-\sigma}\rangle - \frac{1}{2}\, U \sum \langle n_{i\sigma}\rangle \langle n_{i-\sigma}\rangle\,. \tag{8.55}$$

Thực chất, đây chính là gần đúng Hartree Fock đã giới thiệu ở tiết 1.2. Sử dụng Hamiltonian (8.55), bằng cách tương tự như ở bài tập B8.3, ta nhận được phương trình chuyển động

$$\frac{\partial a_{i\sigma}(\tau)}{\partial \tau} = -\sum \varepsilon_{ij} a_{j\sigma} - U\, \langle n_{-\sigma}\rangle\, a_{i\sigma}, \tag{8.56}$$

trong đó, do tính bất biến dịch chuyển, $\langle n_{i\sigma}\rangle \equiv \langle n_{\sigma}\rangle$ không phụ thuộc vị trí nút mạng.

Bây giờ, nếu ta định nghĩa hàm Green:

$$\mathcal{G}(i, j, \sigma;\, \tau) = \left\langle T a_{i\sigma}(\tau)\, a_{j\sigma}^{+}(0)\right\rangle, \tag{8.57}$$

thì tương tự như (8.30), dễ thấy rằng, hàm này tuân theo phương trình chuyển động

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau} + U\, \langle n_{\sigma}\rangle\right) \mathcal{G}(i, j, \sigma;\, \tau) = -\,\delta(\tau) - \sum \varepsilon_{il} \mathcal{G}(l, j, \sigma;\, \tau)\,. \tag{8.58}$$

Bằng biến đổi Fourier như ở tiết trên, phương trình (8.58) chuyển về dạng

$$[-\, i\omega_n + U\, \langle n_{-\sigma}\rangle]\, \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\omega_n, \sigma) = -\,1 - E_k\, \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\omega_n, \sigma)\,, \tag{8.59}$$

với E_k là năng lượng vùng khi không có tương tác.

$$E_k = N^{-1} \sum_{\ell} \varepsilon_{\ell j} \exp\left[-ik\left(\mathbf{R}_\ell - \mathbf{R}_j\right)\right]. \tag{8.60}$$

Phương trình (8.59) cho

$$\mathcal{G}\left(\mathbf{k}, i\omega_n, \sigma\right) = \left[i\omega_n - U\left\langle n_{-\sigma}\right\rangle - E_k\right]^{-1}. \tag{8.61}$$

Để ý dấu của σ ở hai vế của hệ thức này: các spin "lên" (σ) có năng lượng bằng $E_k + U\left\langle n_{-\sigma}\right\rangle$, xác định bởi trường trung bình gây bởi các spin "xuống" ($-\sigma$) và ngược lại, các spin "xuống" ($-\sigma$) có năng lượng $E_k + U\left\langle n_\sigma\right\rangle$, xác định bởi trường trung bình gây bởi các spin "lên" (σ). Đây chính là đặc trưng của gần đúng Hartree. Trạng thái từ của hệ được xác định bằng các trung bình toán tử số spin lên $\langle n_\uparrow\rangle$ và số spin xuống $\langle n_\downarrow\rangle$. Nếu $\langle n_\uparrow\rangle = \langle n_\downarrow\rangle$ thì hệ không có mô men từ tự phát. Các phương trình tự hợp với $\langle n_\uparrow\rangle$ và $\langle n_\downarrow\rangle$ là:

$$\begin{aligned}
\langle n_\uparrow\rangle &= \beta^{-1} \sum_{\omega_n} N^{-1} \sum_k \mathcal{G}\left(\mathbf{k}, i\omega_n, \sigma\right) \\
&= \int dEN(E) f\left[E + U\langle n_\downarrow\rangle\right], & (8.62) \\
\langle n_\downarrow\rangle &= \int dEN(E) f\left[E + U\langle n_\uparrow\rangle\right]. & (8.63)
\end{aligned}$$

ở đây, $N(E)$ là mật độ trạng thái của vùng không nhiễu loạn và $f(E)$ là hàm phân bố Fermi. Trong hàm $f(E)$ có chứa thế hóa học μ. Các phương trình (8.62), (8.63) cùng với điều kiện

$$\langle n_\downarrow\rangle + \langle n_\uparrow\rangle = n \tag{8.64}$$

xác định hoàn toàn các đại lượng μ, $\langle n_\uparrow\rangle$ và $\langle n_\downarrow\rangle$ với n là toán tử số hạt (electron). Hệ phương trình này luôn có một lời giải với $\langle n_\uparrow\rangle = \langle n_\downarrow\rangle$ tương ứng với trạng thái không từ tính.

Ta tìm điều kiện để xuất hiện trạng thái sắt từ. Giả sử nhiệt độ đủ thấp, để có thể gần đúng hàm phân bố Fermi bằng hàm bậc thang của trường hợp

khí electron suy biến $f(\xi) = \theta(\mu - \xi)$, trong đó ξ là năng lượng vùng. Ta giới hạn ở trường hợp sắt từ yếu, nghĩa là khi

$$\langle n_\uparrow \rangle = \frac{1}{2}n + x\,;\; \langle n_\downarrow \rangle = \frac{1}{2}n - x\,, \tag{8.65}$$

với x là nhỏ ($\ll n/2$). Với hai giả thiết này, các phương trình (8.62) và (8.63) dẫn đến

$$n/2 = \int_0^{\mu - Un/2} d\xi N(\xi) - \frac{1}{2}U^2 x^2 N'(\mu - Un/2) \tag{8.66}$$

và

$$x\,[1 - UN(\mu - Un/2)] = (1/6)\,U^3 x^3 N''(\mu - Un/2)\,. \tag{8.67}$$

Ở đây, N' (N'') là đạo hàm bậc một (hai) của N theo năng lượng.

Từ (8.67) ta có nhận xét là, nếu tồn tại các năng lượng vùng ξ_0 sao-cho $UN(\xi_0) = 1$ mà $N''(\xi_0) \neq 0$, thì ta có thể chọn $(\mu - Un/2)$ ở gần ξ_0 để phương trình (8.67) có lời giải x khác không. Nếu $N''(\xi_0) < 0$ thì ta phải chọn $(\mu - Un/2)$ sao cho $UN(\mu - Un/2) > 1$. Còn, nếu $N''(\xi_0) < 0$ thì, ngược lại, $UN(\mu - Un/2) < 1$. Một khi đã xác định được $(\mu - Un/2)$ thì phương trình (8.67) sẽ cho x, rồi thay x tìm được vào (8.66) ta nhận được n, và cuối cùng, hệ thức (8.65) cho $\langle n_\downarrow \rangle$ và $\langle n_\uparrow \rangle$. Như vậy, với những điều kiện vừa thảo luận, mô hình khảo sát có thể dẫn đến xuất hiện trạng thái sắt từ yếu, lưu động. Dĩ nhiên, kết luận này là định tính. Trong khuôn khổ gần đúng Hartree-Fock, khi ta bỏ qua các tương quan địa phương, phần nào ta đã đánh giá quá lên khả năng xuất hiện trạng thái sắt từ.

Để tính đến các tương quan, Hubbard đã không dùng Hamiltonian gần đúng (8.55) mà xuất phát trực tiếp từ (8.53). Phương trình chuyển động đối với toán tử $a_{i\sigma}$ khi đó là

$$\frac{\partial a_{i\sigma}(\tau)}{\partial \tau} = -\sum_j \varepsilon_{ij} a_{j\sigma} - U n_{i-\sigma}(\tau)\, a_{i\sigma}(\tau)\,, \tag{8.68}$$

và tương ứng, đối với hàm Green (8.57):

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \tau}\mathcal{G}(i, j, \sigma; \tau) &= -\delta(\tau)\,\delta_{ij} - \sum \varepsilon_{il}\, \mathcal{G}(l, j, \sigma; \tau) \\ &\quad + U \left\langle T n_{i-\sigma}(\tau)\, a_{i\sigma}(\tau)\, a^+_{j\sigma}(0) \right\rangle . \end{aligned} \tag{8.69}$$

Phương trình này khác với (8.58) ở số hạng cuối, liên quan với $n_{i-\sigma}(\tau)$. Nếu thay $n_{i-\sigma}$ bằng $\langle n_{i-\sigma}\rangle$ như ở (8.55) thì tất nhiên ta sẽ nhận lại (8.58). Nhân tử bên cạnh U ở số hạng cuối trong (8.69) là một hàm Green. Phương trình chuyển động của hàm này là:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\tau}\left\langle Tn_{i-\sigma}(\tau)\, a_{i\sigma}(\tau)\, a^{+}_{j\sigma}(0)\right\rangle &= -\varepsilon_{ii}\left\langle Tn_{i-\sigma}(\tau)\, a_{i\sigma}(\tau)\, a^{+}_{j\sigma}(0)\right\rangle\\ &-\sum_{\ell\neq i}\varepsilon_{i\ell}\left\langle Tn_{i-\sigma}(\tau)\, a_{\ell\sigma}(\tau)\, a^{+}_{j\sigma}(0)\right\rangle\\ &+\sum_{\ell\neq i}\varepsilon_{ij}\left[\left\langle Ta^{+}_{\ell-\sigma}(\tau)\, a_{i-\sigma}(\tau)\, a_{i\sigma}(\tau)\, a^{+}_{j\sigma}(0)\right\rangle\right.\\ &-\left.\left\langle Ta^{+}_{i-\sigma}(\tau)\, a_{\ell-\sigma}(\tau)\, a_{i\sigma}(\tau)\, a^{+}_{j\sigma}(0)\right\rangle\right]\\ &-U\left\langle Tn_{i-\sigma}(\tau)\, a_{i\sigma}(\tau)\, a^{+}_{j\sigma}(0)\right\rangle+\delta_{ij}\left\langle n_{i-\sigma}\right\rangle\delta(\tau)\,. \qquad (8.70)\end{aligned}$$

Khi viết hai số hạng cuối, ta đã sử dụng phương trình toán tử $n_{i-\sigma}(\tau)^2 = n_{i-\sigma}(\tau)$ và hệ thức giao hoán $\left[n_{i-\sigma}a_{i\sigma}, a^{+}_{j\sigma}\right] = n_{i-\sigma}\delta_{ij}$.

Nếu giả thiết rằng, tương quan giữa các electron ở các nút khác nhau là yếu so với tương quan giữa các electron trên cùng một nút, thì trong phương trình (8.70) số hạng thứ ba có thể bỏ qua. Ở số hạng thứ hai ta giả thiết rằng, thăng giáng của $n_{i-\sigma}$ là nhỏ và thay $n_{i-\sigma}$ bằng $\langle n_{-\sigma}\rangle$. Để ý là, cả hai số hạng thứ hai và thứ ba đều bằng không khi ε_{ij} là chéo và không tính đến yếu tố nhảy. Thành thử, trong trường hợp này, hai giả thiết gần đúng đối với hai số hạng vừa nêu trở nên không cần thiết và các kết quả nhận được là hoàn toàn chính xác. Trong trường hợp có yếu tố nhảy, là trường hợp đáng quan tâm hơn, kết quả nhận được sẽ chỉ là gần đúng. Kết quả càng chính xác khi yếu tố nhảy càng yếu, tương ứng với trường hợp vùng năng lượng càng hẹp.

Với các giả thiết trên phương trình (8.70) chuyển về dạng

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial}{\partial\tau}+\varepsilon_{ii}+U\right)&\left\langle Tn_{i-\sigma}(\tau)\, a_{i\sigma}(\tau)\, a^{+}_{j\sigma}(0)\right\rangle\\ &=\langle n_{-\sigma}\rangle\,\delta_{ij}\delta(\tau)-\langle n_{-\sigma}\rangle\sum_{\ell\neq i}\varepsilon_{i\ell}\left\langle Ta_{\ell\sigma}(\tau)\, a^{+}_{j\sigma}(0)\right\rangle\,. \qquad (8.71)\end{aligned}$$

Nếu ta thực hiện biến đổi Fourier của hàm Green bên vế trái

$$\langle T n_{i-\sigma}(\tau)\, a_{i\sigma}(\tau)\, a^{+}_{j\sigma}(0)\rangle = \beta^{-1}\sum_{\omega_n}\exp(-i\omega_n\tau)\,\mathcal{G}(i,j,\sigma;\, i\omega_n)\ , \tag{8.72}$$

thì có thể chuyển (8.71) về

$$(-i\omega_n + \varepsilon_{ii} + U)\,\mathcal{G}(i,j,\sigma;\, i\omega_n) = \langle n_{-\sigma}\rangle\left[\delta_{ij} + \sum_{\ell\neq i}\varepsilon_{i\ell}\,\mathcal{G}(\ell,j,\sigma;\, i\omega_n)\right]\ . \tag{8.73}$$

Trở lại phương trình (8.69). Thực hiện biến đổi Fourier hai vế của phương trình này, trong đó biến đổi Fourier của số hạng cuối xác định theo (8.72) - (8.73). Kết quả là, phương trình (8.69) trở thành

$$(-i\omega_n)\,\mathcal{G}(i,j,\sigma;\, i\omega_n) = -\delta_{ij} - \sum_{\ell}\varepsilon_{i\ell}\,\mathcal{G}(\ell,j,\sigma;\, i\omega_n) +$$
$$+U\langle n_{-\sigma}\rangle\left[\delta_{ij} - \varepsilon_{ii}\mathcal{G}(i,j,\sigma;\, i\omega_n) + \sum_{\ell}\varepsilon_{i\ell}\,\mathcal{G}(\ell,j,\sigma;\, i\omega_n)\right]\cdot (-i\omega_n + \varepsilon_{ii} + U)^{-1}\,.$$

Thực hiện tiếp biến đổi Fourier theo biến không gian, $\mathcal{G}(i,j,\sigma;\, i\omega_n)\rightarrow \mathcal{G}(\mathbf{k},\sigma;\, i\omega_n)$, ta có:

$$\left[-i\omega_n + E_k\left(1 - \frac{U\langle n_{-\sigma}\rangle}{-i\omega_n + \varepsilon_0 + U}\right) + \frac{\varepsilon_0 U\langle n_{-\sigma}\rangle}{-i\omega_n + \varepsilon_0 + U}\right].\mathcal{G}(\mathbf{k},\sigma; i\omega_n) = -1 + \frac{U\langle n_{-\sigma}\rangle}{-i\omega_n + \varepsilon_0 + U}\ , \tag{8.74}$$

ở đây $\varepsilon_0 = \varepsilon_{ii}$. Và, do đó:

$$\mathcal{G}(\mathbf{k},\sigma;\, i\omega_n) = \frac{i\omega_n - \varepsilon_0 - U(1 - \langle n_{-\sigma}\rangle)}{(-i\omega_n + E_k)(-i\omega_n + \varepsilon_0 + U) + U\langle n_{-\sigma}\rangle(\varepsilon_0 - E_k)}\,. \tag{8.75}$$

Thực hiện thay $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$ như ở (3.73), ta có

$$G(\mathbf{k}.\sigma;\omega) = \frac{\omega - \varepsilon_0 - U(1 - \langle n_{-\sigma}\rangle)}{(\omega - E_k)(\omega - \varepsilon_0 - U) + U\langle n_{-\sigma}\rangle(\varepsilon_0 - E_k)}\,. \tag{8.76}$$

Vì mẫu số ở (8.76) là đa thức bậc hai của ω, với $\langle n_{-\sigma}\rangle$ và k đã cho, hàm Green (8.76) có hai cực $E_{k\sigma}^{(1)}$ và $E_{k\sigma}^{(2)}$. Hơn nữa, vì mẫu số này là dương với ω lớn, là thực và âm khi $\omega = \varepsilon_0 + U(1 - \langle n_{-\sigma}\rangle)$, nên cả hai cực của hàm Green là thực và thỏa mãn hệ thức:

$$E_{k\sigma}^{(1)} < \varepsilon_0 + U(1 - \langle n_{-\sigma}\rangle) < E_{k\sigma}^{(2)}. \tag{8.77}$$

Điều này nghĩa là, trong gần đúng khảo sát, các kích thích là những giả hạt nằm ở hai vùng tách biệt nhau.

Trong trường hợp không có yếu tố nhảy, $E_k = \varepsilon_0$, từ mẫu số của (8.76) thấy ngay là các năng lượng giả hạt là ε_0 và $\varepsilon_0 + U$, tương ứng với năng lượng cần thiết để đặt một electron vào một nút (ε_0) và năng lượng cần thiết để đặt electron thứ hai cũng vào nút đó ($\varepsilon_0 + U$). Hiệu ứng nhảy làm hai mức này nở ra thành hai vùng năng lượng riêng biệt.

Cuối cùng, để xác định trạng thái từ của hệ, tương tự như ở trên, ta phải tìm hệ thức tự hợp cho $\langle n_\sigma\rangle$ và thế hóa học μ. Bởi vì hàm Green (8.75) rõ ràng có dạng

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \sigma; i\omega_n) = -\frac{\partial D(i\omega_n, E_k)/\partial E_k}{D(i\omega_n, E_k)}, \tag{8.78}$$

nên ta có thể viết

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \sigma; i\omega_n) = \frac{dE_{k\sigma}^{(1)}/dE_k}{-i\omega_n - E_{k\sigma}^{(1)} + \mu} - \frac{dE_{k\sigma}^{(2)}/dE_k}{-i\omega_n - E_{k\sigma}^{(2)} + \mu}, \tag{8.79}$$

ở đây, với cùng ý nghĩa như ở (8.62) - (8.67), ta đã đưa vào thế hóa học μ. Và, cũng tương tự như (8.62) - (8.67), khi nhiệt độ đủ thấp để có thể gần đúng hàm phân bố Fermi bằng hàm $\theta\left(\mu - E_{k\sigma}^{(1,2)}\right)$, ta có:

$$\begin{aligned}
\langle n_\uparrow\rangle &= \beta^{-1}\sum_{\omega_n} N^{-1}\sum_k \mathcal{G}(\mathbf{k}, \uparrow; i\omega_n) \\
&= \int d\epsilon N(\epsilon)\,\frac{dE_{k\uparrow}^{(1)}}{dE_k}\,\theta\left(\mu - E_{k\uparrow}^{(1)}\right) \\
&\quad + \int d\epsilon N(\epsilon)\,\frac{dE_{k\uparrow}^{(2)}}{dE_k}\,\theta\left(\mu - E_{k\uparrow}^{(2)}\right) \\
&= \int_{-\infty}^{\mu} dE\, N\left[\epsilon_\uparrow(E)\right].
\end{aligned} \tag{8.80}$$

Ở dòng cuối cùng ta đã đổi biến tích phân từ ϵ sang năng lượng giả hạt E. Hàm $\epsilon_{\uparrow}(E)$ liên kết năng lượng không nhiễu loạn ϵ với năng lượng nhiễu loạn E qua hệ thức

$$E^2 - E\left(\epsilon_{\uparrow} + \varepsilon_0 + U\right) + U\left\langle n_{\downarrow}\right\rangle\left(\varepsilon_0 - \epsilon_{\uparrow}\right) + \epsilon_{\uparrow}\left(\varepsilon_0 + U\right) = 0.$$

Và, như vậy

$$\epsilon_{\uparrow} = \frac{E^2 - E\left(\varepsilon_0 + U\right) + U\left\langle n_{\downarrow}\right\rangle \varepsilon_0}{E + U\left(\left\langle n_{\downarrow}\right\rangle - 1\right) - \varepsilon_0}. \tag{8.81}$$

Các tích phân ở (8.80) lấy theo hai vùng năng lượng cho phép (tương ứng $E_{k\uparrow}^{(1)}$ và $E_{k\uparrow}^{(2)}$) với cận trên là μ.

Tương tự, với spin "xuống":

$$\left\langle n_{\downarrow}\right\rangle = \int_{-\infty}^{\mu} dEN\left[\epsilon_{\downarrow}(E)\right] \tag{8.82}$$

và

$$\left\langle n_{\uparrow}\right\rangle + \left\langle n_{\downarrow}\right\rangle = n. \tag{8.83}$$

Các hệ thức (8.80) - (8.83) xác định $\langle n_{\uparrow}\rangle$, $\langle n_{\downarrow}\rangle$ và μ như hàm của mật độ electron toàn phần n. Cũng như trong gần đúng Hartree-Fock, các phương trình này luôn có một lời giải $\langle n_{\downarrow}\rangle = \langle n_{\uparrow}\rangle = n/2$, tương ứng với trạng thái không từ tính. Nếu trong hệ, số electron đúng bằng số nguyên tử, thì vùng năng lượng thấp hơn sẽ choán đầy hoàn toàn, còn vùng trên sẽ hoàn toàn trống, hai vùng tách biệt nhau. Như vậy, do tương tác U giữa các electron trên cùng một nút, kim loại chuyển thành điện môi. Chuyển pha loại như vậy thường gọi là chuyển pha Mott-Hubbard (xem, Mott 1974). Theo thảo luận ở trên, thì chuyển pha có thể xảy ra ở U bất kỳ. Nhưng, xem xét chính xác hơn cho thấy chuyển pha chỉ có thể xảy ra khi U vượt quá một giá trị tới hạn U_c nào đó.

Khi phần sắt từ là nhỏ, thì thay đổi bậc nhất trong phương trình (8.82), liên quan với sự lệch nhỏ của $\langle n_{\uparrow}\rangle$ khỏi $n/2$, có thể xem là bằng không. Điều này ngụ ý:

$$1 = -\int_{-\infty}^{\mu} dE\left.\frac{\partial N\left[\epsilon_{\uparrow}(E)\right]}{\partial\left\langle n_{\downarrow}\right\rangle}\right|_{\left\langle n_{\downarrow}\right\rangle = n/2}. \tag{8.84}$$

Với mô hình vùng chữ nhật:

$$N(\epsilon) = 1/W \quad \text{với} \quad -W/2 < \epsilon < W/2, \ \varepsilon_0 = 0; \tag{8.85}$$

và với μ nằm ở vùng dưới, hệ thức (8.84) qui về

$$1 = (1/2)\, U \left[U^2 + W^2/4 + UW(1-n)\right]^{-1/2} . \tag{8.86}$$

Ta thấy, khi μ nằm ở vùng dưới, $n < 1$, phương trình (8.86) không luôn thỏa mãn với U và W bất kỳ. Do tính đối xứng giữa electron và lỗ trống, kết luận này cũng đúng cho trường hợp, khi μ nằm ở vùng trên. Như vậy, bằng khảo sát bổ sung ta dẫn đến kết luận khác với kết quả gần đúng Hartree-Fock, trong đó trạng thái sắt từ có thể tồn tại với U và W bất kỳ.

Hubbard cho rằng, có thể chọn dạng vùng năng lượng thích hợp để quan sát được trạng thái sắt từ. Một khả năng là:

$$N(\epsilon) = \begin{cases} \delta^{-1}, & \text{với } \varepsilon_0 - W/2 < \epsilon < \varepsilon_0 - W/2 + \delta/2 \\ & \text{và } \varepsilon_0 + W/2 - \delta/2 < \epsilon < \varepsilon_0 + W/2 \\ 0, & \text{nếu } \epsilon \text{ không thuộc các miền trên} . \end{cases} \tag{8.87}$$

Với vùng năng lượng (8.87), hệ thức (8.84) trở thành

$$\delta < (1/2)\, WU \left[(U/2 + W/2)^2 - nWU/4\right]^{-1/2} . \tag{8.88}$$

Hệ thức này luôn thỏa mãn với δ đủ nhỏ. Mô hình vùng (8.88) có dạng hai đỉnh nhọn, dáng điệu đặc trưng của các vật liệu sắt từ. Cũng phải nói thêm rằng, ở các kim loại thực, các vùng d và f luôn là suy biến, nên việc áp dụng các mô hình lý thuyết đòi hỏi phải có xem xét bổ sung, thận trọng.

Trên đây chỉ là thảo luận bước đầu, như một minh họa về hàm Green trong mô hình Hubbard. Trong thực tế mô hình này đã nhận được sự chú ý đặc biệt ngay từ khi mới xuất hiện và ngày nay đã trở thành nội dung không thể thiếu trong các sách giáo khoa về lý thuyết chất rắn (xem, chẳng hạn, Mahan 2000).

Thảo luận bổ xung và bài tập

B8.1 Giả sử trong Hamiltonian (8.13) tích phân trao đổi J_{ij} có giá trị xác định trên hai phương: $J_{ij} = J_{\parallel}$ trên phương của trục z và $J_{ij} = J_{\perp}$ trên phương vuông góc với trục z. Khi đó:

(1) Nếu $J_{\perp} = 0$, thì mô hình Heisenberg (8.14) chuyển về mô hình Ising ($J_{\parallel} \equiv J$):

$$\mathcal{H} = -J\sum_{(ij)} S_i^{(z)} S_j^{(z)} - g\mu_B B \sum S_i^{(z)};$$

(2) Nếu $J_{\parallel} = 0$ và $B = 0$, thì ta có mô hình XY (XY - model)

$$\mathcal{H} = -J\sum_{(ij)} S_i^{(+)} . S_j^{(-)} .$$

B8.2 Chứng minh rằng, toán tử $\sum_i S_i^{(z)} \equiv (S_{total})^{(z)}$ giao hoán với Hamiltonian (8.14).

B8.3 Hãy dẫn ra phương trình chuyển động (8.28).
Trả lời: Xuất phát từ

$$\mathcal{H} = -g\mu_B H_{\text{eff}} \sum S_i^{(z)} - \frac{1}{2}\sum J_{ij}\left(S_i^{(+)} S_j^{(-)} + S_i^{(-)} S_j^{(+)}\right) .$$

Theo định nghĩa

$$\begin{aligned}
\dot{S}_k^{(+)} &= -i\left(S_k^{(+)}\mathcal{H} - \mathcal{H}S_k^{(+)}\right) \\
&= -i\Bigg\{-g\mu_B H_{\text{eff}}\left[\sum_i\left(S_k^{(+)} S_i^{(z)} - S_i^{(z)} S_k^{(+)}\right)\right] \\
&\quad -\frac{1}{2}\sum J_{ij}\Big[\left(S_k^{(+)} S_i^{(+)} S_j^{(-)} - S_i^{(+)} S_j^{(-)} S_k^{(+)}\right) \\
&\quad + \left(S_k^{(+)} S_i^{(-)} S_j^{(+)} - S_i^{(-)} S_j^{(+)} S_k^{(+)}\right)\Big]\Bigg\} .
\end{aligned}$$

Sử dụng các hệ thức giao hoán (8.12), và gần đúng (8.27), ta có

$$\dot{S}_k^{(+)} = -i\left\{-g\mu_B H_{\text{eff}} S_k^{(+)} + 2\sum_j J_{kj} S_j^{(+)}\left\langle S^{(z)}\right\rangle\right\} .$$

Chú ý rằng, đại lượng $\dot{S}_k^{(+)}$ là đạo hàm của $S_k^{(+)}$ theo t. Vì $dS_k^{(+)}/dt = i\, dS_k^{(+)}/d\tau$, hệ thức nhận được ở trên cho chính xác phương trình chuyển động (8.28).

Các phương trình chuyển động khác trong chương này đều có thể nhận được bằng cách tương tự.

B8.4 Hãy dẫn ra hệ thức (8.86) từ điều kiện (8.84) với mô hình vùng năng lượng (8.85)

Phụ lục A

Ký hiệu "bra" và "ket" của Dirac

Dirac xem hàm sóng ψ, hay chính xác hơn, tập hợp các thành phần của nó trong một hệ trục tọa độ nào đó (một biểu diễn nào đó), là một vectơ "ket", ký hiệu là $|\,\psi\rangle$. Chẳng hạn, hàm sóng $\psi_{n\ell m}$ mô tả trạng thái với các số lượng tử n, l, m được ký hiệu là $|\,nlm\rangle$. Hàm liên hợp phức của ψ được gọi là vectơ "bra", ký hiệu là $\langle\psi|$. Chẳng hạn, $\psi^*_{n\ell m}$ ký hiệu là $\langle nlm|$. Trong ký hiệu ma trận vectơ "ket" tương ứng một cột, còn vectơ "bra" tương ứng một dòng. Tích vô hướng của một vectơ "bra" $\psi^*_b = \langle b|$ và một vectơ "ket" $\psi_a = |\,a\rangle$ được ký hiệu là $\langle b|\,a\rangle$, nghĩa là:

$$\int \psi^*_b\,(x)\,\psi_a\,(x)\,dx = \langle b|\,a\rangle\ . \qquad \text{(A.1)}$$

Mặt khác, tích vô hướng trên lại có thể giải thích như là hàm sóng ψ_a trong b biểu diễn. Nói chung, hàm sóng $\psi_a\,(x)$, đặc trưng bởi "a" trong "x"-biểu diễn, trong ký hiệu Dirac có dạng:

$$\psi_a\,(x) = \langle x|\,a\rangle\,. \qquad \text{(A.2)}$$

Từ (A.1) và (A.2) suy ra:

$$\langle x|\,a\rangle = \int \langle x|\,b\rangle\,\langle b|\,a\rangle\,db\,,$$

và

$$\langle b|\,a\rangle = \langle a|\,b\rangle^*\,.$$

Trong ký hiệu Dirac, phương trình $\mathcal{H}\psi_n\,(\mathbf{r}) = E_n\psi_n\,(\mathbf{r})$ có dạng $\mathcal{H}\,|\,\psi_n\rangle = E_n\,|\psi_n\rangle$. Các điều kiện trực giao:

$$\int \psi^*_n\,(\mathbf{r})\,\psi_m\,(\mathbf{r})\,d\mathbf{r} = \delta_{nm} \Rightarrow \langle\psi_n|\,\psi_m\rangle = \delta_{nm},$$

và đầy đủ:

$$\sum \psi_n(\mathbf{r})\,\psi_n^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \Rightarrow \sum_n |\,\psi_n\rangle\,\langle\psi_n| = 1.$$

Các yếu tố ma trận được ký hiệu như sau:

$$F_{ba} = \int \psi_b^* F \psi_a d\Omega = \langle b|\,F|\,a\rangle\ .$$

Nếu các trạng thái a và b đặc trưng tương ứng bởi các số lượng tử (n, l, m) và (n', l', m'), thì ta có yếu tố ma trận của F trong ký hiệu Dirac là $\langle n'l'm'|\,F|\,nlm\rangle$.

Phụ lục B

Tính chất của hàm delta

Hàm delta do Dirac đề xuất thường ký hiệu là $\delta(x)$, trong đó x là biến. Hàm $\delta(x)$ bằng không khắp nơi, trừ điểm $x = 0$, tại đó hàm này lớn đến nỗi mà

$$\int_a^b \delta(x)\,dx = 1 \quad \text{với} \quad a < 0 < b\ . \tag{B.1}$$

Tính chất quan trọng nhất của hàm delta là, với hàm $F(x)$ liên tục bất kỳ, ta luôn có

$$\int_a^b F(x)\,\delta(x)\,dx = F(0) \quad ; \ a < 0 < b\ . \tag{B.2}$$

Bằng dịch gốc toạ độ, hệ thức (B.2) có thể chuyển về dạng

$$\int F(x)\,\delta(x-x_0)\,dx = F(x_0)\,, \tag{B.3}$$

trong đó miền lấy tích phân bao điểm x_0 (nếu ngược lại, thì tích phân sẽ bằng không).

Hàm delta không phải là hàm số theo nghĩa thông thường: ứng với các giá trị của biến có các giá trị của hàm. Hàm này được xác định bằng quy tắc tích phân tích của nó với các hàm liên tục. Tuy nhiên, hàm delta có thể xem xét như giới hạn của dãy các hàm giải tích. Chẳng hạn,

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \to \infty} \frac{\sin(x\alpha)}{\pi x}. \tag{B.4}$$

Thật vậy, khi $x = 0$, hàm $\sin(x\alpha)/\pi x = \alpha/\pi$, phân kỳ khi $\alpha \to \infty$. Khi tăng $|x|$, hàm này dao động mạnh quanh giá trị không với biên độ giảm dần. Và, quan trọng là, cũng như hàm $\delta(x)$, với α bất kỳ

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin \alpha x}{\pi x}\, dx = 1.$$

Từ (B.4) suy ra một hệ thức quan trọng, thường xuyên sử dụng trong cuốn sách này:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk = \delta(x). \tag{B.5}$$

Viết tách phần thực và phần ảo của hệ thức này, ta có các tích phân

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \cos(kx)\, dk = \delta(x); \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \sin(kx)\, dk = 0.$$

Ngoài (B.4), các biểu thức giới hạn khác của hàm $\delta(x)$ có thể là:

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{\alpha \to 0} \frac{\alpha}{\alpha^2 + x^2}, \tag{B.6}$$

hay

$$\delta(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \lim_{\alpha \to 0} \left[\alpha \exp\left(-x^2/\alpha^2\right)\right]. \tag{B.7}$$

Hàm $\delta(x)$ còn có thể xác định như đạo hàm của hàm bậc thang (Heaviside function) $\theta(x)$: $\theta(x) = 0$ với $x < 0$ và $\theta(x) = 1$ với $x > 0$. Rõ ràng

là, giống như $\delta(x)$, ta có $\theta'(x) = 0$ khi $x \neq 0$. Và, hơn nữa $\theta'(x)$ cũng có tính chất (B.2):

$$\begin{aligned}\int_a^b F(x)\,\theta'(x)\,dx &= F(x)\,\theta(x)|_a^b - \int_a^b \theta(x)\,F'(x)\,dx \\ &= F(b) - \int_a^b F'(x)\,dx = F(0)\ .\end{aligned}$$

Với khí electron suy biến, hàm phân bố Fermi có thể gần đúng bằng hàm θ và hệ thức $\theta'(x) = \delta(x)$ rất có ích trong tính các tích phân.

Dưới đây là một số đồng nhất thức cơ bản. Ý nghĩa của các đồng nhất thức này là ở chỗ, nếu sử dụng như là một nhân tử dưới dấu tích phân thì hai vế của mỗi đẳng thức sẽ cho cùng một kết quả:

$$\begin{aligned}\delta(-x) &= \delta(x)\ ;\ \ \delta'(-x) = -\delta'(x)\ ; \\ x\delta(x) &= 0; \qquad x\delta'(x) = -\delta(x)\ ; \\ \delta(ax) &= \frac{1}{a}\delta(x)\ ;\ \ a > 0\ ; \\ \delta\left(x^2 - a^2\right) &= \left[\delta(x-a) + \delta(x+a)\right]/2|a|\ ; \\ \int \delta(a-x)\,\delta(x-b)\,dx &= \delta(a-b)\ ; \\ f(x)\,\delta(x-a) &= f(a)\,\delta(x-a)\ ; \\ \int f(x)\,\delta'(x-a)\,dx &= -f'(a)\ ; \\ \delta[f(x)] &= \sum_i \delta(x-x_i)\,/|\,(\partial f/\partial x)_{x=x_i}\,|,\end{aligned}$$

trong đó x_i là nghiệm đơn giản của phương trình $f(x) = 0$.

Hàm $\delta(x)$ là một hàm chẵn, nên $\delta'(x)$ là một hàm lẻ. Vì $\delta(x)$ là hàm chẵn, nên ta có:

$$\int_0^a \delta(x)\,dx = \begin{cases} 1/2 & \text{nếu } a > 0 \\ -1/2 & \text{nếu } a < 0\ . \end{cases} \tag{B.8}$$

Hàm delta ba chiều $\delta(\mathbf{r})$ được định nghĩa bằng:

$$\delta(\mathbf{r}) = \delta(x)\,\delta(y)\,\delta(z) = (2\pi)^{-3}\int e^{i\mathbf{kr}}d\mathbf{k}\ . \tag{B.9}$$

Hàm $\delta(\mathbf{r})$ có tính chất:

$$\int \delta(\mathbf{r}) F(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = F(0) \; ; \tag{B.10}$$

$$\delta(\mathbf{r}) = \delta(r)/2\pi r^2 \; ; \tag{B.11}$$

$$\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = \frac{2}{r^2} \delta(\mathbf{n}' - \mathbf{n}) \delta(r' - r) \, , \tag{B.12}$$

trong đó $\mathbf{n}'$ và $\mathbf{n}$ là các vectơ đơn vị theo phương $\mathbf{r}'$ và $\mathbf{r}$. Cũng giống như với $\delta(x)$, các đồng nhất thức ở trên đối với $\delta(\mathbf{r})$ cũng có nghĩa là, nếu trong tích phân có một nhân tử là vế này hay vế kia của đẳng thức thì các kết quả là như nhau (tích phân lấy từ $r = 0$).

Cùng với đồng nhất thức (1.70) ở phần thảo luận bổ sung B1.3 (chương 1), ta còn có

$$\lim_{t\to\infty} \frac{1 - \exp(-ixt)}{ix} = \pi\delta(x) - iP\left(\frac{1}{x}\right) . \tag{B.13}$$

Trong các tài liệu tham khảo, ngoài hàm $\delta(x)$, đôi khi còn gặp các hàm $\delta_+(x)$ và $\delta_-(x)$:

$$\delta_+(x) = \delta_-^*(x) = \frac{1}{2\pi i} \lim_{\alpha\to 0} (x - i\alpha)^{-1} . \tag{B.14}$$

Từ (B.14) và (B.6), ta có:

$$\delta_+(x) + \delta_-(x) = \lim_{\alpha\to 0} \frac{1}{\pi} \frac{\alpha}{x^2 + \alpha^2}$$

$$= \delta(x) \; ; \tag{B.15}$$

$$\delta_+(x) - \delta_-(x) = \lim_{\alpha\to 0} \frac{1}{\pi i} \frac{x}{x^2 + \alpha^2} . \tag{B.16}$$

Phụ lục C

Lượng tử hóa lần thứ hai

Trong chương 2, các hàm Green một hạt được xác định trực tiếp qua các hàm sóng, còn trong chương 3, các hàm Green của hệ hạt có tương tác được định nghĩa qua các toán tử trường, tức là hàm sóng đã được lượng tử hóa thành các toán tử (lượng tử hóa lần thứ hai). Nội dung của phụ lục này là giới thiệu tóm tắt phương pháp lượng tử hóa lần thứ hai.

Trường hợp các hạt bose. Phương trình Schrödinger của một hạt trong thế ngoài $U(\mathbf{r})$ là:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-U(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r},t)=0\;. \tag{C.1}$$

Phương trình này có thể nhận được từ phương trình Lagrange với mật độ Lagrangian:

$$L=i\hbar\psi^+\dot{\psi}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^+\nabla\psi-U\psi^+\psi\;. \tag{C.2}$$

xem ψ và ψ^+ là các biến độc-lập.

Trong hình thức luận Lagrange, giữa biến ψ và momentum liên hợp với nó π, có hệ-thức $\pi=\partial L/\partial\dot{\psi}$. Với Lagrangian L dạng (C.2), ta có:

$$\pi=i\hbar\psi^+(r)\;. \tag{C.3}$$

Khi đó, mật độ Hamiltonian là:

$$H=\pi\dot{\psi}-L=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^+\nabla\psi+U\psi^+\psi. \tag{C.4}$$

Đồng thời, cặp biến liên hợp (ψ,π) thỏa mãn hệ thức giao hoán:

$$[\psi(\mathbf{r},t)\,,\,\pi(\mathbf{r}',t)]=i\hbar\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,, \tag{C.5}$$

hay với π từ (C.3):

$$\left[\psi(\mathbf{r},t)\,,\,\psi^+(\mathbf{r}',t)\right]=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,. \tag{C.5'}$$

Hệ thức giao hoán này chính là cơ sở của lượng tử hóa lần hai các hạt bose, mà nội dung của nó là thay biến ψ và momentum liên hợp của nó π bằng các toán tử thỏa mãn hệ thức giao hoán (C.5).

Nếu Hamiltonian $\mathcal{H} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2 + U(r)$ có các hàm riêng ϕ_λ và trị riêng tương ứng ε_λ, thì ta luôn có thể khai triển $\psi(\mathbf{r}, t)$ và $\psi^+(\mathbf{r}, t)$:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_\lambda a_\lambda \phi_\lambda(\mathbf{r})\ e^{-iE_\lambda t/\hbar}\ ; \tag{C.6}$$

$$\psi^+(\mathbf{r}, t) = \sum_\lambda a_\lambda^+ \phi_\lambda^*(\mathbf{r})\ e^{iE_\lambda t/\hbar}\ . \tag{C.6'}$$

Hệ thức giao hoán (C.5') sẽ được thỏa mãn, nếu các toán tử sinh a^+ và hủy a tuân theo các hệ thức giao hoán sau:

$$\begin{aligned} &\left[a_\lambda, a_{\lambda'}^+\right] \equiv a_\lambda a_{\lambda'}^+ - a_{\lambda'}^+ a_\lambda = \delta_{\lambda\lambda'}, \\ &\left[a_\lambda, a_{\lambda'}\right] = 0; \quad \left[a_\lambda^+, a_{\lambda'}^+\right] = 0. \end{aligned} \tag{C.7}$$

Các hệ thức giao hoán với các biến trường là:

$$\begin{aligned} &[\psi(\mathbf{r}, t), \psi(\mathbf{r}', t)] = 0; \quad [\psi^+(\mathbf{r}, t), \psi^+(\mathbf{r}', t)] = 0\ ; \\ &[\psi(\mathbf{r}, t), \psi^+(\mathbf{r}', t)] = \textstyle\sum_\lambda \phi_\lambda(\mathbf{r})\, \phi_\lambda^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\ . \end{aligned} \tag{C.8}$$

Với ψ (C.6) và ψ^+ (C.6') Hamiltonian một hạt có dạng

$$\mathcal{H} = \int d\mathbf{r}\psi^+ H \psi = \sum_{\lambda\lambda'} a_\lambda^+ a_{\lambda'} \int d\mathbf{r}\phi_\lambda^*(\mathbf{r})\, H \phi_{\lambda'}(\mathbf{r}) = \sum_\lambda \varepsilon_\lambda a_\lambda^+ a_\lambda. \tag{C.9}$$

Hamiltonian này mô tả một dao động tử điều hòa. Hàm riêng và trị riêng của (C.9) tương ứng là:

$$\prod_\lambda \frac{\left(a_\lambda^+\right)^{n_\lambda}}{\sqrt{n}_\lambda}\ |0\rangle \quad \text{và} \quad E = \sum_\lambda \varepsilon_\lambda n_\lambda\ ,$$

trong đó n_λ là số choán đầy của trạng thái λ.
Toán tử mật độ có dạng

$$\rho(\mathbf{r}) = \psi^+(\mathbf{r})\, \psi(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda\lambda'} a_\lambda^+ a_{\lambda'}\, \phi_\lambda^*(\mathbf{r})\, \phi_{\lambda'}(\mathbf{r}) \tag{C.10}$$

và toán tử số hạt:

$$N = \int d\mathbf{r}\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} a_{\lambda}^{+} a_{\lambda}. \tag{C.11}$$

Trung bình nhiệt của N là $\langle N\rangle = \sum_{\lambda}\langle n_{\lambda}\rangle$ trong đó, ở cân bằng nhiệt $\langle n_{\lambda}\rangle = [\exp(\beta(\varepsilon_{\lambda} - \mu)) - 1]^{-1}$.

Trường hợp các hạt Fermi. Với các hạt tuân theo thống kê Fermi, thay vì (C.8), các toán tử trường tuân theo hệ thức phản giao hoán dạng:

$$\begin{aligned} &\{\psi(\mathbf{r}), \psi^{+}(\mathbf{r}')\} \equiv \psi(\mathbf{r})\psi^{+}(\mathbf{r}') + \psi^{+}(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \ ; \\ &\{\psi(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{r}')\} = 0; \ \ \{\psi^{+}(\mathbf{r}), \psi^{+}(\mathbf{r}')\} = 0, \end{aligned} \tag{C.12}$$

Nếu phân tích $\psi(\mathbf{r})$ và $\psi^{+}(\mathbf{r})$ theo hệ cơ sở $\phi_{\lambda}(\mathbf{r})$:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} c_{\lambda}\phi_{\lambda}(\mathbf{r}) \ ; \ \ \psi^{+}(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} c_{\lambda}^{+}\phi_{\lambda}^{*}(\mathbf{r}),$$

thì các toán tử sinh c_{λ}^{+} và hủy c_{λ} tuân theo hệ thức phản giao hoán

$$\{c_{\lambda}, c_{\lambda'}^{+}\} = \delta_{\lambda\lambda'}; \quad \{c_{\lambda}, c_{\lambda'}\} = 0; \quad \{c_{\lambda}^{+}, c_{\lambda'}^{+}\} = 0. \tag{C.13}$$

Hai hệ thức cuối của (C.13) cho $c_{\lambda}c_{\lambda} = 0$ và $c_{\lambda}^{+}c_{\lambda}^{+} = 0$. Đây là hệ quả của nguyên lý Pauli: ở một trạng thái λ bất kỳ không thể có nhiều hơn một hạt. Nếu ký hiệu $|0\rangle_{\lambda}$ và $|1\rangle_{\lambda}$ là các trạng thái λ không có hạt nào và chỉ có một hạt, thì rõ ràng là:

$$c_{\lambda}|1\rangle_{\lambda} = |0\rangle_{\lambda} \ ; \ \ c_{\lambda}|0\rangle_{\lambda} = 0; \ \ c_{\lambda}^{+}|1\rangle_{\lambda} = 0 \ ; \ \ c_{\lambda}^{+}|0\rangle_{\lambda} = |1\rangle_{\lambda}.$$

Điều này cũng thấy rõ nếu ta xem xét toán tử số hạt

$$N_{\lambda} = c_{\lambda}^{+}c_{\lambda} \tag{C.14}$$

Bình phương của đại lượng này cho

$$N_{\lambda}^{2} = c_{\lambda}^{+}c_{\lambda}c_{\lambda}^{+}c_{\lambda} = c_{\lambda}^{+}\left(1 - c_{\lambda}^{+}c_{\lambda}\right)c_{\lambda} = c_{\lambda}^{+}c_{\lambda} - c_{\lambda}^{+}c_{\lambda}^{+}c_{\lambda}c_{\lambda} = c_{\lambda}^{+}c_{\lambda} = N_{\lambda}$$

Để thỏa mãn hệ thức này N_{λ} chỉ có thể nhận hai giá trị : không hoặc một. Đó chính là nguyên lý Pauli.

Khi làm việc với hệ fermion, Hamiltonian thường gặp nhất có dạng

$$\mathcal{H} = \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \right]. \qquad \text{(C.15)}$$

trong đó $U(\mathbf{r})$ là thế ngoài, còn $V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ là thế tương tác cặp. Trong biểu diễn lượng tử hóa lần thứ hai, Hamiltonian (C.15) chuyển thành:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum H_{nm} c_n^+ c_m + \frac{1}{2} \sum V_{k\ell mn} C_k^+ C_m^+ C_n C_\ell ; \\ H_{nm} &= \int d\mathbf{r} \phi_n^* (\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] \phi_m (\mathbf{r}) ; \\ V_{k\ell mn} &= \int d\mathbf{r}_i \int d\mathbf{r}_j \phi_k^* (\mathbf{r}_i) \phi_\ell (\mathbf{r}_i) V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \phi_m^* (\mathbf{r}_j) \phi_n (\mathbf{r}_j) . \end{aligned}$$

Để ý rằng, các Hamiltonian đối với hệ boson và fermion thường có dạng tương tự nhau. Khác nhau giữa hai hệ là ở các hệ thức giao hoán của các toán tử.

Phụ lục D

Hàm tương quan và hàm Green

Trung bình của toán tử mật độ (C.10), $\langle | \psi^+ (r) \psi (r) | \rangle$, là mật độ trung bình tại r, còn $N^{-1} \int \rho(\mathbf{r})\, d\Omega$ lấy trên thể tích nhỏ $\Delta\Omega$ có giá trị trung bình bằng $p(\mathbf{r})\, \Delta\Omega$, thì mang ý nghĩa là xác suất tìm hạt trong $\Delta\Omega$, trong đó $p(\mathbf{r})$ là mật độ xác suất:

$$p(\mathbf{r}) = N^{-1} \langle | \rho(\mathbf{r}) | \rangle ; \quad \int p(\mathbf{r})\, d\Omega = 1,$$

tích phân lấy trên toàn bộ thể tích của hệ.

Xét tích $\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')$. Vì $\rho(\mathbf{r})$ và $\rho(\mathbf{r}')$ là giao hoán với nhau, tích này là một toán tử Hermite. Giá trị trung bình $\langle|\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')|\rangle$ bằng không nếu không có hạt cả ở $\mathbf{r}$ lẫn $\mathbf{r}'$. Tích phân $N^{-2}\int\rho(\mathbf{r})\,d\Omega\int\rho(\mathbf{r}')\,d\Omega'$ lấy trên các thể tích nhỏ $\Delta\Omega$ và $\Delta\Omega'$ có giá trị trung bình là $\int P(\mathbf{r},\mathbf{r}')\,d\Omega d\Omega'$, với ý nghĩa là xác suất để có một hạt trong yếu tố $\Delta\Omega$ và một hạt khác trong $\Delta\Omega'$, trong đó $P(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ là mật độ xác suất có một hạt ở $\mathbf{r}$ và một hạt khác ở $\mathbf{r}'$:

$$P(\mathbf{r},\mathbf{r}') = N^{-2}\langle|\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')|\rangle\ .$$

Nếu không có tương quan nào giữa xác suất tìm hạt ở $\mathbf{r}$ và xác suất tìm hạt ở $\mathbf{r}'$ thì $P(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')$, tức là

$$\langle|\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')|\rangle = \langle|\rho(\mathbf{r})|\rangle\langle|\rho(\mathbf{r}')|\rangle\,. \qquad (D.1)$$

Điều này xảy ra ở hệ các hạt độc lập về mặt thống kê. Trong thực tế, giữa các hạt luôn có tương tác và thường không có đẳng thức (D.1). Hiệu

$$\langle|\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')|\rangle - \langle|\rho(\mathbf{r})|\rangle\langle|\rho(\mathbf{r}')|\rangle \qquad (D.2)$$

mô tả tương quan giữa vị trí của các hạt. Dù rằng, chính hiệu này mới đúng là số đo của tương quan, người ta gọi đại lượng

$$\langle|\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})|\rangle \qquad (D.3)$$

là hàm tương quan mật độ - mật độ.

Một cách tổng quát, với hai toán tử bất kỳ giao hoán với nhau, A và B, đại lượng

$$C_{AB} = \langle|AB|\rangle \qquad (D.4)$$

được gọi là hàm tương quan giữa chúng. Nếu A và B không giao hoán với nhau, nghĩa là chúng không đo được một cách đồng thời, thì, một cách chính xác, không thể nói về tương quan giữa chúng. Tuy nhiên, với các hệ vĩ mô, phép đo đại lượng này ảnh hưởng không đáng kể đến đại lượng kia, nên ngay cả khi hai toán tử không giao hoán, người ta vẫn sử dụng hàm tương quan. Ngoài ra, trong tài liệu tham khảo cũng không có sự nhất quán

về định nghĩa: một số người sử dụng định nghĩa (D.4), số khác, trong đó có Kubo (Kubo 1957) định nghĩa hàm tương quan giữa A và B là

$$C^{s}_{AB} = \frac{1}{2}\langle| AB + BA|\rangle \equiv \frac{1}{2}\langle|\{A, B\}|\rangle . \tag{D.5}$$

Định nghĩa này sẽ trùng với (D.4) nếu A và B giao hoán với nhau.

Hàm Green một hạt trong biểu diễn toạ độ được định nghĩa là:

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i\left\langle| T\psi_{\alpha}(\mathbf{r}, t)\, \psi^{+}_{\beta}(\mathbf{r}', t')\, |\right\rangle , \tag{D.6}$$

trong đó α, β là các chỉ số spin. Khi không có tính sắt từ và từ trường ngoài, nói chung, không cần để ý đến biến spin, vì luôn đơn giản có $G_{\alpha\beta} = G.\delta_{\alpha\beta}$. Ta thấy có sự tương tự trong biểu thức định nghĩa của hàm tương quan và hàm Green. Các phản ứng tuyến tính của hệ có thể biểu diễn qua một trong hai hàm này. Tuy nhiên, để ý tới toán tử trật tự thời gian T trong (D.6), hai hàm này không trùng nhau. Điểm khác nhau cơ bản giữa chúng là, trong khi các hàm Green (cũng như đạo hàm theo thời gian của chúng) là gián đoạn tại $t = t'$, các hàm tương quan không có tính chất này.

Dễ thấy rằng, một mặt, bằng biến đổi Fourier theo biến không gian, định nghĩa (D.6) sẽ chuyển về dạng hàm Green trong biểu diễn momentum ở chương 3. Mặt khác, bằng sử dụng khai triển dạng (C.6) và (C.6') từ định nghĩa (D.6) ta dễ dàng nhận được dạng hàm Green biểu diễn qua hàm sóng ở chương 2. Các định nghĩa này là tương đương.

Tài liệu tham khảo

[1] Abrahams, E., P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, 1979. *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673.

[2] Abrahams, E. and T. V. Ramakrishnan, 1980, *J.Non-Cryst. Solids* **35**, 15.

[3] Abrahams, E., S. V. Kravchenko, and M. P. Sarachik, 2001, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 251.

[4] Abramowitz, M. and I. A. Stegun (eds), 1965, *Handbook of Mathematical Functions, Drover, London.*

[5] Abrikosov, A. A., L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinski, 1965, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics, Pergamon Press, Oxford.*

[6] Altshuler, B. L. and A. G. Aronov, 1985, *in Electron-Electron Interactions in Disordered Systems, edited by A. L. Efros and M. Pollak, North-Holland, Amsterdam.*

[7] Altshuler, B. L., A. G. Aronov, and E. E. Khmelnitskii, 1982, *J. Phys.* **C15**, 7367.

[8] Anderson, P. W., 1958, *Phys. Rev.* **109**, 1492.

[9] Anderson, P. W. and P. A. Lee, 1980, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **69**, 212.

[10] Anderson, P. W., 1997, *Concepts in Solids, World Scientific, Singapore.*

[11] Bardeen, J., L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, 1957, *Phys. Rev.* **108**, 1175.

[12] Bergmann G., 1984, *Phys. Rep.* **107**, 1.

[13] Bloch, F., 1928, *Zs. Phys.* **52**, 555.

[14] Bogoliubov, N. and S. V. Tyablikov, 1959, *Sov. Phys. - Doklady* **4**, 604.

[15] Callaway, J., 1964a, *Energy Band Theory, Academic Press, New York.*

[16] Callaway, J., 1964b, *J. Math. Phys.* **5**, 783.

[17] Cooper, L. N., 1956, *Phys. Rev.* **104**, 1189.

[18] Datta, S., 1992, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems, Cambridge University Press, Cambridge.*

[19] Doniach, S. and E. H. Sondheimer, 1974, *Green's Functions for Solid State Physics, Benjamin, Massachusetts.*

[20] Drude, P., 1990, *Ann. Physik.* **1**, 566.

[21] Dyson, F. J., 1956, *Phys. Rev.* **102**, 1217, 1230.

[22] Economou, E. N., 1983, *Green Functions in Quantum Physics, Springer-Verlag, Berlin.*

[23] Edwards, S. F., 1958, *Phil. Mag.* **3**, 1020.

[24] Ferrer, M., M. A. Moore, and M. Wortis, 1971, *Phys. Rev.* **B4**, 3954.

[25] Ferry, D. K and S. M. Goodnick, 1997, *Transport in Nanostructures, Cambridge University Press, Cambridge.*

[26] Feynman, R. P., 1951, *Phys. Rev.* **84**, 108.

[27] Fisher, M. E., 1965, *The Nature of Critical Points, University of Colorado Press, Colorado.*

[28] Fock, V., 1930, *Zs. Phys.* **61**, 126; **62**, 795.

[29] Gell-Mann, M. and F. Low, 1951 *Phys. Rev.* **84**, 350.

[30] Gorkov, L. P., A. I. Larkin, and D. E. Khmelnitskii, 1979, *JETP. Lett.* **30**, 248.

[31] Green, G., 1828, *An Essay on the Application of Mathematical Analysis to the Theories of Electricity and Magnetism, Nottingham.*

[32] Greenwood, D. A., 1958, *Proc. Phys. Soc.* **71**, 585.

[33] Harrison, W. A., 1980, *Electronic Structure and the Properties of Solids, Freeman, San Francisco.*

[34] Hartree, D. R., 1928, *Proc. Cambr. Phil. Soc.* **24**, 111.

[35] Heisenberg, W., 1928, *Zs. Phys.* **49**, 619.

[36] Horiguchi, T., 1971, *J. Phys. Soc. Jpn.* **30**, 1261.

[37] Horiguchi, T., 1972, *J. Math. Phys.* **13**, 1411.

[38] van Hove, L., 1953, *Phys. Rev.* **89**, 1189.

[39] Hubbard, J., 1963, *Proc. Roy. Soc. (London)* **A276**, 238.

[40] Hubbard, J., 1964, *Proc. Roy. Soc. (London)* **A277**, 237; **A281**, 401.

[41] Imry, Y., 1997, *Introduction to Mesoscopic Physics, Oxford University Press, New York.*

[42] Ioffe, A. F. and A. R. Regel, 1960, *Prog. in Semiconductors.* **4**, 237.

[43] Jackson, J. D., 1967, *Classical Electrodynamics, Wiley, New York.*

[44] Janssen, M., 2001, *Fluctuations and Localization in Mesoscopic Electron Systems, World Scientific, Singapore.*

[45] Kittel, C., 1986, *Introduction to Solid State Physics, 6th-edition, Wiley, New York.*

[46] von Klitzing, K., G. Dorda, and M. Pepper, 1980, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494.

[47] Kohn, W. and J. M. Luttinger, 1957, *Phys. Rev.* **108**, 590.

[48] Kohn, W. and L. J. Sham, 1965, *Phys. Rev.* **140A**, 1133.

[49] Kondo, J., 1964, *Prog. Theor. Phys.* **32**, 37.

[50] Koopman, T., 1933, *Physica* **1**, 104.

[51] Kramer, B. and A. MacKinnon, 1993, *Rep. Prog. Phys.* **56**, 1469.

[52] Kravchenko, S. V., W. Mason, J. E. Furneaux, and V. M. Pudalov, 1995, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 910.

[53] Kubo, R., 1956, *Canad. J. Phys.* **34**, 1274.

[54] Kubo, R., M. Toda, and N. Hashitsume, 1985, *Statistical Physics II - Nonequilibrium Statistical Mechanics, Springer-Verlag, Berlin.*

[55] Landau, L. D. and E. M. Lifshitz, 1958, *Statistical Physics, Pergamon, London.*

[56] Landau, L. D. and E. M. Lifshitz, 1960, *Quantum Mechanics, Pergamon, London.*

[57] Landauer, R., 1957, *IBM J. Res. Rev.* **1**, 223.

[58] Langer, J. S. and T. Neal, 1966, *Phys. Rev. Lett.* **16**, 984.

[59] Lee, P. A. and D. S. Fisher, 1981, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 882.

[60] Lee, P. A. and T. V. Ramakrishnan, 1985, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287.

[61] Lifshitz, I. M. and V. Ya. Kirpichenkov, 1979, *Sov. Phys. JETP* **50**, 499.

[62] Licciardello, D. C., and D. J. Thouless, 1975, *J. Phys. C* **8**, 4157.

[63] MacKinnon, A. and B. Kramer, 1983, *in The Application of High Magnetic Fields in Semiconductor Physics, Vol. 177 of Lecture Notes in Physics, edited by G. Landwehr, Springer-Verlag, Berlin.*

[64] Mahan, G. D., 2000, *Many Particle Physics, 3rd - edition, Kluwer Academic, New York.*

[65] March, N. H., W. H. Young, and S. Sampantnar, 1967, *The Many-Body Problem in Quantum Mechanics, Cambridge University Press, Cambridge.*

[66] Martin, P. C. and J. Schwinger, 1959, *Phys. Rev.* **115**, 1342.

[67] Matsubara, T., 1955, *Prog. Theor. Phys. (Kyoto)* **14**, 351.

[68] Meht, M. and D. Papaconstantopoulos, 1996, *Phys. Rev.* **B54**, 4519.

[69] Morita, T., 1971, *J. Math. Phys.* **12**, 1744.

[70] Morita, T., 1975, *J. Phys.* **A8**, 478.

[71] Morse, P. M. and H. Feshbach, 1953, *Methods of Theoretical Physics, Mc Graw-Hill, New York.*

[72] Mott, N. F. and W. D. Twose, 1961, *Adv. Phys.* **10**, 107.

[73] Mott, N. F., 1966, *Phil. Mag.* **13**, 989.

[74] Mott, N. F., 1967, *Adv. Phys.* **16**, 49.

[75] Mott, N. F., 1974, *Metal-Insulator Transitions, Taylor & Francis, London.*

[76] Mott, N. F. and E. A. Davis, 1979, *Electronic Properties in Non-Crystalline Materials, 2nd- Edition, Clarendon Press, Oxford.*

[77] Nagaoka, Y. and H. Fukuyama (eds.), 1982, *Anderson Localization, Springer-Verlag, Berlin.*

[78] Nguyen, V. L., B. Z. Spivak, and B. I. Shklovskii, 1985, *JETP Lett.* **41**, 42 ; *Sov. Phys. JETP* **62**, 1021.

[79] Ohno, K., K. Esfarjani, and Y. Kawazoe, 1999, *Computational Materials Science, Springer-Verlag, Berlin.*

[80] Ortenburger, I., 1964, *Phys. Rev.* **136A**, 1374.

[81] Patashinskii, A. Z. and V. L. Pokrovskii, 1980, *Fluctuation Theory of Phase Transition, International Series in Natural Philosophy Vol. 98, Pergamon Press, Oxford.*

[82] Pepper, M., 1982, *in Disordered Systems and Localization Proceedings, edited by C. Castellani, C. DiCastro, and L. Petiti, Lecture Notes in Physics, Vol. 149, Springer-Verlag, Berlin.*

[83] Schiff, L. I., 1968, *Quantum Mechanics, Mc Graw-Hill, New York.*

[84] Shklovskii, B. I. and A. L. Efros 1984, *Electronic Properties of Doped Semiconductors, Springer-Verlag, Berlin.*

[85] Slater, J. C., 1951, *Phys. Rev.* **81**, 385.

[86] Slater, J. C. and G. F. Koster, 1954, *Phys. Rev.* **94**, 1498.

[87] Sommerfeld, A., 1928, *Zs. Phys.* **47**, 1.

[88] Stein, J. and U. Krey, 1980, Z. *Phys.* B**37**, 18.

[89] Tahir-Kheli, R. A. and ter Haar, D., 1962, *Phys. Rev.* **127**, 88.

[90] Thouless, D. J., 1974, *Phys. Rep.* **13**, 93.

[91] Toda, M., R. Kubo, and N. Saito, 1983, *Statistical Physics I - Equilibrium Statistical Mechanics, Springer-Verlag, Berlin.*

[92] Tyablikov, S. V., 1967, *Methods in the Quantum Theory of Magnetism, Plenum, New York.*

[93] Vollhardt, D. and P. Wölfle, 1982, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 699.

[94] Wannier, G. H. 1959, *Elements of Solid State Theory, Cambridge University Press, Cambridge.*

[95] Weiss, P., 1909, *J. de Phys.* **6**, 667.

[96] Wilson, K. G. and M. E. Fisher, 1972, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 240.

[97] Xu, C., C. Z. Wang, C. T. Chan, and K. M. Ho, 1992, *J. Phys.: Condens. Matter.* **4**, 6047.

[98] Ziman, J. M., 1964, *Principles of the Theory of Solids, Cambridge University Press, Cambridge.*

[99] Ziman, J. M., 1979, *Models of Disorder, Cambridge University Press, Cambridge.*

Chỉ dẫn chủ đề

Chịu trách nhiệm xuất bản:

Giám đốc: PHÙNG QUỐC BẢO

Tổng biên tập: PHẠM THÀNH HƯNG

Nhận xét: GS. TSKH. NGUYỄN ÁI VIỆT

GS. TS. NGUYỄN TOÀN THẮNG

Biên tập: NGUYỄN THẾ HIỆN

Chế bản và sửa bản in:

PHÒNG MÁY TÍNH VIỆN VẬT LÝ

TRUNG TÂM KHOA HỌC TỰ NHIÊN VÀ CÔNG NGHỆ QUỐC GIA

Trình bày bìa: VĂN SÁNG

HÀM GREEN TRONG VẬT LÝ CHẤT RẮN (Bài toán một hạt)

Mã số: 1L - 02002 - 01403

In 500 cuốn, khổ 16 x 24 tại Nhà in Đại học Quốc gia Hà Nội

Số xuất bản: 34/992/CXB ngày 08/8/2003. Số trích ngang 225 KH/XB

In xong và nộp lưu chiểu quý IV năm 2003